シッフ

新版

量子力学（上）

井上 健 訳

物理学叢書
2

吉岡書店

新 版

量 子 力 学

(上)

シ ッ フ 著

井 上 健 訳

物 理 学 叢 書

2

吉 岡 書 店

QUANTUM MECHANICS

THIRD EDITION

LEONARD I. SCHIFF
Professor of Physics
Stanford University

McGRAW-HILL BOOK COMPANY
New York
St. Louis
San Francisco
Toronto
London
Sydney



Dear Professor Kobayasi:

I am very pleased to have this book published in a Japanese translation. The subject of quantum mechanics is now an essential part of the education of every physicist, and I shall be honored to have my treatment of this material more widely used for study and reference in Japan.

Very sincerely yours,

Leonard I. Schiff

Leonard I. Schiff

フランシスへ

序　　文

本書は次の三重の目的をもっている：量子力学の物理的概念を説明すること，量子力学の数学的理論形式を述べること，量子力学で用いられるアイディアおよび方法の両者についての典型的な例を示すこと，この三つである．本書は大学の専門課程での教科書として，同時にまた参考書として役立つよう意図されている．したがって，その程度の読者としては当然親しいものになっていると考えられる程度の古典力学，電磁理論，原子構造および微分方程式についての知識は仮定されている；ただし，行列ないしは群論についてあらかじめ通じていることは必要でない．その上さらに，読者としては複素数（第IX章）および特殊相対性理論（第XIII章）に或程度接したことのある方が望ましい．

著者としては，数学的な厳密性を貫徹するよう特に試みなかったとはいえ，本書で用いられている解析的方法は大抵の理論物理学者を満足させるものと信じている．たとえば，和・微分・積分等の演算の入れ替えとか，δ関数の使用とかに対して，その妥当性の議論には殆どあるいは全く触れていない．しかし一方では，得られた結果の本性を調べて，それを物理的に理由づけることはできうる限り行なってある．

問題は各章ごとにその章末にあげてある．これらの問題の多くは本文で論じられた諸点を具体的にはっきりさせたり，強調したりするための役をしている．本書の全体を通じて理論的な原著論文への参照は行なってある；しかしそのリストは網羅的であるより代表的なものに止めた．実験的な諸結果については，大多数の場合参照論文をあげることなしに引用してある．というのはこの種の分野では適当にとりまとめるのに必要な文献さえ膨大な量になって，本書のような理論物理学に関する書物としてはそぐはないと思われたからである．特定の題目についてのより立ち入った議論のためには，量子力学およびそれに関連する主題をもついくつかの書物および綜合報告の類いを参考としてあげておいた．

本書に収められている範囲に対する大体の見通しを得るのには，全体を三つの部分に分けてみるのが一番都合がよい．最初の三章は量子力学への序論をなすもので，そこでは物理的な基礎概念が論じられていると同時に，それらを基にして Schrödinger の波動力学の理論形式が確立されている．次の九章で説明されているのは，束縛状態および衝突問題の双方に対する波動方程式の厳密な解，Heisenberg の行列力学の理論形式と変換理論，対称性，近似法，散乱行列，同一粒子，輻射の理論，さらに原子系へのいくつかの応用といった問題である．一応，第XII章までのところが専門課程の初年度で教えられている素材の大部分を含むことになるので，電磁輻射の半古典論的な取り扱いは，その結果の中のいくつかは後に第XV章でもう一度得られるということがあるにしても，第X章としてこの種の素材の中に組み込んでおくのが望ましいように思われる．最後の2章は，相対論的な粒子の理論および量子化された場への序論になっている．

本書の第一版は20年前に完成され，比較的少数の修正が第二版〔1955年〕においてなされた．したがって今回の改訂は必然的に広範囲に及ぶものにならざるをえないと同時に，今回の改訂に当って旧版のもつ包括的な性格が頁数の実数的な増加なしに保持されるよう心掛けられている．追加された主な題目は次の個所である；複素ポテンシャルと相反性と光学定理に関する一節（§20）；行列および変換理論についての説明をはるかに詳しくした部分（第VI章）；幾何学的ならびに力学的対称性を論じた新しい一章，ここには角運動量の十分詳しい説明が含まれている（第VII章）；束縛状態および衝突問題に対する近似法の取り扱いをかなりの程度に拡大した部分，この部分には散乱行列とその応用，解析性および分散式が含まれる（第VIII章および第IX章）；密度演算子および密度行列に関する新しい一節（§42）．第二版から削除された主な題目は散乱の変分的取り扱い，Cerenkov 効果の理論および Dirac 方程式の量子化である；なお第二版の最後の二節は本書では幾分圧縮されて一つの節にまとめられている（§57）．記法上の変更もある程度行なったが，これは現行の用法に近づけるためになされたものである．さらに裏表紙の内側にいくつかの物理量の数値表を付け加えておいた．*)

著者としては，本書の第一版を準備するに当って故 J. R. Oppenheimer 教授および Robert Serber 教授に負うところの多大であったことを今回も重ねて記録に止めておきたいと思う．著者はまた本書の旧版によって勉強したり，それに基づいて授業を

*) 訳書では，付録として上巻の巻末に添えておいた．

行なった人達の中で，多数の有益な示唆を寄せられた方々に感謝の意を表するものである．特に，E. H. Wichmann 教授は，第二版についての徹底的な批評を準備されたが，それは本書が現在のような形をとる上に実質的に貢献するものであった．さらに著者は，この第三版の種々の形の草稿によって講義を受けた多数の学生諸君には，彼等の種々の補足的な意見に対して謝意を表したいと思う．特に J. D. Walecka 教授には特定の節についてのその建設的な批判に対してお礼を申しあげる．

Leonard I. Schiff

第 一 版 の 序

量子力学における Schiff の教科書の地位については今更いうまでもなかろう．著者の個性とか独創性とかを表面に出すことなく，偏らない立場でオーソドックスに書かれたものとして，現在ではアメリカのみでなく広く世界的なスタンダードのテキストとなっている．一見，淡々として書き進められているようであるが，表現や配置にすみずみまで細心な注意がはらわれていて，全く完全に近い構成がとられている．このテキストが今日の地位をかち得たことは著者の努力から見て当然なことであろう．

このテキストの邦訳については種々困難な事情もあったが，原著者 Schiff 教授の非常な御厚意によって McGraw-Hill 社の同意を得，吉岡書店の物理学叢書に加えることができたものである．出版に際し Schiff 教授に深甚の謝意を表したい．訳は井上健氏がかなり以前より手がけておられたのでお願いすることになったが，同氏の御都合により出版の運びまでに相当の日時を要したことは残念であった．しかし予想外に長引いたことは井上氏の御多忙ばかりでなく，同氏の良心的な推敲によるものであって，それだけ反訳には念が入れられていることと信じている．このテキストが量子力学一般を学ぶ学生諸君に広く利用せられ，さらにそれぞれの専門に進むための基礎として十分に消化されることを望んでいる．

1957年初夏

小　林　稔

訳者のことば

本書は L. I. Schiff "Quantum Mechanics" (McGraw-Hill Book Company Inc.) の第三版（1970年）による飜訳である．本書はもともと McGraw-Hill 社から刊行されている叢書 "*International Series in Pure and Applied Physics*"（現在．本書の著者はその Consulting Editor である）の一冊として1948年に出版された．その後1955年に改訂されたが，その間を通じて欧米諸国において大学の専門課程における標準的教科書としての声価を持続してきている．著者は現在スタンフォード大学の物理学の教授であり，主として量子力学を中心とした理論的研究を行なっている．単に量子力学の応用面についてばかりでなく，一般相対論・素粒子論を含む基礎理論的な面についても関心を寄せ幅の広い研究活動を行なっている．なお，1960年頃からスタンフォード大学で計画された200億電子ボルトの直線状の電子加速器の建設にあたっては，単に理論グループの中心であったばかりでなく，実験の Hofstadter 教授とともに全体のリーダーとして計画的・組織的研究をみごとに完成させたことは，著者の穏健・堅実な学風と同時に優れた包容力・組織力を物語っているといってよい．1953年秋，日本で行なわれた最初の国際理論物理学会議に際して来日し，わが国の研究者の間にもなじみ深い．1969年夏この第三版の原稿完成直後に，休暇を利用して本書が捧げられている夫人とともに再度来日された際，研究者との討論・学生への講義の間に，日本の風物に対する変らぬ愛着が語られたことは訳者にとって印象深い．なお，その際に，未だ刊行予定の段階であった第三版の飜訳について直ちに快諾を与えられ，その後出版社との交渉に一方ならぬ配慮を示された．本訳書の成立については，最初に原著者への紹介の労をとっていただいた小林稔京大教授とともに，原著者の好意に対しても深く感謝する次第である．

原著はもともと一巻であるが，訳書は上下二分冊として刊行される．本書の性格・構成については原著者自身によって序文に懇切な注意が述べられているので，ここ

に繰り返す必要はないであろう．一般的な感想を付け加えるならば，これまでの量子力学の教科書にくらべて，原理的な構成・応用的問題の説明を適当なバランスで，手頃な分量の中に盛り込んだ手腕はみごとであるといってよい．とりわけ，導かれた結果についての物理的解釈は極めてゆきとどいている．この点については，著者が第一版への序文以来繰り返し述べているように，1937年から1940年の間のカリフォルニア大学における故 J. R. Oppenheimer 教授との協同研究生活の賜物でもあろうが，初学者にとって特に教訓的であり，本書の魅力の一つであろう．ともかく，これまでのこの種の書物の多くが原理的な構成あるいは応用上の有用性のいずれかにかたよりがちであったのに対し，本書がよい意味でのアメリカ的な性格によって，第一版刊行以来内外で広く歓迎されてきている理由は十分うなづけるところである．今回のかなり大幅な改訂は本書の up-to-date な有用性を益々高らしめているといってよい．なお，この訳書を基にして量子力学をより進んで学ばれる日本の読者への補足的な参考として，わが国で刊行されたこの分野の教科書・参考書の紹介を下巻の巻末に「訳者のあとがき」として付け加えておいた．また，各章の問題は原著者によって指摘されているように，本書による量子力学の理解にかなり重要な役割を負わされている部分である．その意味で，またこれまでの読者からの希望もあって，問題の略解を別にとりまとめて刊行することにした．（井上・瀬藤・三枝著「量子力学演習」吉岡書店，1971）もちろん，この種の書物の功罪については種々の意見がありうるものと思われるが，少なくとも種々の制限された条件の下で，独学に励まれる人達にとって益することがあるものと期待している．

本訳書は，もともと1951年に訳者が京都大学で担当した理論物理学のゼミナールで原著の第一版をテキストとして採用した際，そのゼミナールに参加した大槻昭一郎（現九大教授），故岩重純二（元東大助教授），広重徹（現日大助教授）の三氏が作製されたノートに発するものであった．ただし，現在の形における翻訳についての責任は訳者の負うものである．それにつけても，第二版の訳書の欠陥について，種々の注意を与えられた多数の読者に対して，また，原稿の整理・校正にあたってお世話になった津田彩子氏に対してこの機会に感謝の意を表するものである．

最後に，この訳書が，今後の若い研究者の勉学の糧として，これまで同様に活用されることを期待するとともに，豊かな才能を十分に発揮するいとまもなく，惜しんでも余りある早逝をとげた故岩重純二氏の思い出にこの訳書を捧げることにしたいと思う．

最後に念のため，翻訳技術上の注意を列挙しておく．

i）翻訳にあたっては，なるべく原文に忠実であるよう心掛けたつもりである．ただし，構文上または理解しやすくするために訳者によって意識的に補われた部分は〔…〕で標示してある．なお，原文での挿入句の標示としては（…）が主に用いられており，また式番号を示す括弧を中に含む場合には〔…〕が原文でも用いられているが，特に区別する必要はないと思われるので，原文中の挿入句はすべて（…）に統一しておいた．

ii）本文の区切りは，原文通り章，節，小節により，節は通し番号によって分類してある．ただし，原文には小節には番号が付されていないが，訳文では引用の便宜上，各小節ごとに各節の番号を頭にとって二重の番号を付しておいた．またパラグラフとして指定されるのは小節中の各段落を意味する．

iii）適当な訳語がない等の理由によって原語を併記しておく方が望ましいと判断された場合には本文中の相当の箇所に並列してあげてある．それに対し，原文中イタリックで記されている箇所はゴジック体にし，そのあとに原文通りイタリックを付した．

iv）本文に対する注は，原注は 1)，2)，…の数字で，訳注は ＊ † 等の記号で標示してある．

1970年12月

井　上　　健

追　記

本訳書の刊行準備中，思いがけずも原著者 Schiff 教授急逝の報に接した．夫人のお便りによれば，1月19日昼食に向う途中，大学構内の駐車場での全く突然の心臓発作によるものであったとのこと．ここに謹んで哀悼の意を表するとともに，第三版の訳書のために著者の近影を貸与されたフランシス夫人のご好意に対し衷心よりお礼申しあげる．

原著者の手によって本格的に改訂された形でこの訳書を提供し得ることは，不幸中の幸いという他はない．訳者としては，本訳書を図らずも二重の思い出に捧げることになった．それにつけても，この訳書を機縁として，原著者がその59年の生涯の中で，なみなみならぬ情熱と努力とを注いだこの労作の価値が，わが国の読者によって十分生かされんことを重ねて期待する念や切である．

1971年5月

井　上　　健

目　　次

(上　巻)

第VI章 量子力学の行列形式

第VII章　量子力学における対称性

第 I 章　量子力学の物理的基礎

現在のわれわれの知識段階では，量子力学は原子的現象についての基礎理論とみなすことができる．量子力学の根拠になっている実験的な材料は殆ど完全にわれわれの直接の知覚の領域を超えたところでの物理的な事象からもってこられている．その意味では，この理論が普通一般の日常経験とは相容れない物理的な概念をいろいろと含んでいるのは驚くべきことではない．しかしながら，量子力学がつくりあげられていった歴史の途上において，だんだんとこれらの概念があらわれたのではなく，これらの概念が明らかにされたのはある全く完全な数学的理論形式がうみ出されてしまってからのことであった．いかなる物理理論についてもその究極的なテストとして観測事実との定量的な比較ということが必要である．量子力学の場合にはこの必要性がまず最初に理論形式を導き，その後に始めて理論形式の物理的な言葉での解釈ということがなされたのであった．

量子力学の主な内容を紹介するにあたって，歴史的な順序をはなれて，物理的な概念の議論と平行して数学的な理論形式の展開についてまず最初に述べるのが望ましいように思われる．[1] 本章ではまず最初に実験的な背景と前期量子論の考え方について簡略に概観し，つぎに不確定性および相補性という，より新しい物理的な概念を論じ，そして最後に第 II 章で展開されるはずの最も広く用いられている形での理論形式に対する準備作業をしておくことにする．話の進め方としては基礎的な諸実験から〔最後的な〕理論形式の構造を〔一義的に〕導き出してくるというやり方はとらないつもりである．つまり理論の展開を一義的にするよりもそれが説得力があると思われるようにするよう心掛けるつもりである．したがって理論の妥当性はそれから導かれてくる事柄と実験との一致および理論形式自身の（実際計算上の意味でよりも原理的な意味での）簡単さと首尾一貫性に根拠をもつことになるわけである．

---

1) 歴史的な発展の詳細な検討には，M. Jammer, "The Conceptual Development of Quantum Mechanics," (McGraw-Hill, New York, 1966) を見よ．

1□実 験 的 背 景

1900年までの実験物理学は，すでに広い範囲の多種多様な現象の存在を明らかにしていたが，その大部分は現在**古典的な** *classical* 理論物理学とよばれているものを使って説明できると信じられていた．力学的な物体の運動では天体的な尺度においてもまた地球上の尺度のものであってもともに Newton の方程式を用いての議論が成功を収めていた．この理論を分子運動に適用することによって気体の分子運動論において役に立つ結果が生み出されていたし，1897年の J. J. Thomson による電子の発見も，電子がニュートン的な粒子として振舞うことを示すことにその根拠を得ていたのであった．光の波動性も1803年の Young の回折実験によって強力に示唆されてはいたが，1864年の光学現象と電気現象との関連についての Maxwell の発見によってより強固な基礎の上におかれることになった．

1-1　古典物理学の破綻

実験的結果を理解する上での困難が今世紀の初頭においてもいろいろと残ってはいたが，それらの大部分は適当な原子の模型をつくり上げる問題かあるいはその当時発見されたばかりのエックス線および放射能の問題に関係するものであった．とはいうものの，また一方では当然理解できるはずでありながら実際には解釈のできない現象に附随した困難もあった；黒体からの熱輻射のスペクトル分布とか，低温における固体の比熱とか，あるいは常温での自由な二原子分子の運動において5個の自由度しかあらわれないということはそのような種類の問題であった．

この第二の種類の困難を解く手始めは1900年に Planck によってなされた．Planck は電磁的輻射の放出・吸収は離散的な**量子** *quanta* として行なわれると仮定することによって，黒体輻射の問題を説明することができた．その際これらの量子はそれぞれ，輻射の振動数 ν に，ある普遍定数 h（**プランクの定数** *Planck's constant* とよばれる）を掛けただけのエネルギーを含んでいるものとされた；すなわち

$$E=h\nu \tag{1.1}$$

この量子の考えは，後に Einstein によって光電効果についての実験的観測結果のある

面を説明するために用いられた．このようにして，電磁的輻射の二重の性格ははっきりしたものになってきた：すなわちある場合には波動のようにまた他の場合には粒々の量子の流れのように振舞うわけである．

殆ど同じ年代に，固体の比熱についての Einstein および Debye の理論，Ritz によるスペクトル線の分類の仕事，原子との衝突による電子の離散的なエネルギー損失についての Frank および Herz の実験，さらに（年代は少し後になるが）外部磁場の方向の原子の磁気能率の成分が離散的な値をとることを示した Stern および Gerlach の実験が出て〔電磁的輻射のみならず〕原子系の測定可能なパラメーターに対しても離散的な値が存在することが明らかになってきた．

1-2 主要な実験と考え方の一覧

このようにして今世紀の第一・四半期の理論物理学には 1900 年以前には存在しない，その後の種々の実験およびその解釈を通して得られた二つの重要な推論が含まれていた．すなわち電磁的輻射の二重性および物理量に対しての離散的な値の存在というこの二つである．第 1 表に主要な実験的結論と理論的な考え方の関係を一覧表として示してある；もっと詳細な議論および文献については，原子物理学についての書物を参照されたい．[1]

第三の理論的な考え方は 1924 年にあらわれたが，それは物質もまた二重の（粒子的および波動的）性質をもつという de Broglie の示唆によるものであった；de Broglie は粒子の運動量 p とそれに対応する波の波長 λ との間の関係が

$$\lambda=\frac{h}{p} \tag{1.2}$$

で与えられると仮定した．[2] その当時まであらゆる根拠の示すところは物質はとびとび

1) たとえば次のものを見よ．F. K. Richtmyer, E. H. Kennard および T. Lauritsen, "Introduction to Modern Physics," (McGraw-Hill, New York, 1955)；M. Born, "Atomic Physics" (Hafner, New York, 1951；邦訳：金関，鈴木共訳「現代物理学上，下」みすず書房，1954年)；G. P. Harnwell-W. E. Stephens, "Atomic Physics," (McGraw-Hill, New York, 1955).

2) 方程式 (1.2) は (1.1) の両辺を光速度 c で割ってみれば分かるように光の量子に対しても成立する．なぜならばある方向をもった光線では $p=E/c$ および $\lambda=c/\nu$ という関係が成り立つからである．

のニュートン的粒子から構成されていることに他ならなかった；特に電子やヘリウム原子核のような荷電粒子は1911年に C. T. R. Wilson によって発明されたものと同種の膨脹型の霧箱の中でその鮮明な飛跡が観測されるようになっていた．しかしながら，この de Broglie の考えが出てから間もなく Davisson-Germer (1927) および G.P. Thomson (1928) はそれぞれ独立に結晶による電子の回折を観測し，かくして de Broglie の推測の主な点は確証されたのであった．

第1表　実験の解釈と理論的な考え方との関係

回　折 (Young 1803, Laue 1912)	……電磁波としての光
黒体輻射 (Planck 1900) 光電効果 (Einstein 1904) コンプトン効果 (Compton 1923) スペクトル線の結合則 (Ritz-Rydberg 1908)	……電磁的量子としての光
比　熱 (Einstein 1907, Debye 1912) Frank-Herz の実験 (1913) Stern-Gerlach の実験 (1922)	……物理量の離散的な値の存在

2□前 期 量 子 論

現在，**前期量子論** *old quantum theory*[1] とよばれているところのものは黒体輻射についての Planck の仕事によって始められ，さらに Einstein および Debye によって展開されていった．しかしながら，理論を原子についての何らかの定量的な記述に用いうるようになったのは，原子が小さいが質量の大部分をしめる正の荷電を帯びた原子核とそれを取りまく電子とから構成されているという Rutherford の1911年の発見を待たねばならなかった．

2-1　Bohr-Sommerfeld の量子化の規則

このような方向への第一歩は1913年に Bohr によってふみ出された．すなわち Bohr は原子の電子構造いいかえれば核外の構造について二つの要請をおいた．第一の要請は

1)　この節で与えたよりももっと詳しい議論をするためには先にあげた書物，およびL. Pauling-E. B. Wilson Jr., "Introduction to Quantum Mechanics" (McGraw-Hill, New York, 1935；邦訳：玉木，他訳「量子力学序論」白水社，1951) の第二章をみよ．

ある原子系はそれぞれが系の一つの確定したエネルギーに対応している特定の定常的なまたは量子化された状態にのみ存在しうるということである．一つの定常状態からもう一つの定常状態への転移に伴って，この二つの状態のエネルギーの差に等しい量のエネルギーの増減がそれぞれの場合に応じておこる；この増減した分のエネルギーは電磁的輻射の量子の形であらわれたり，あるいは他の系の内部エネルギーまたは運動エネルギーの形をとってあらわれたりする．第二の 要請は（Planck および Einstein の場合と同じく）一つの輻射の量子はそのエネルギーをプランクの常数 h で割ったものに等しい振動数をもつということである．

明らかにこれらの二つの要請は始めから Ritz の結合法則と Frank-Herz の実験に対して何らかの見透しを含んでいたといえる．水素に対する特定の結果を導くために，Bohr は定常状態を構成するべき円軌道を選び出すための簡単な規則を提案した；すなわち〔その軌道の〕角運動量は $h/2\pi$ の整数倍でなければならないとした．W. Wilson (1915) および A. Sommerfeld (1916) は独立にもっと一般的な量子化の規則を見出したが，それによって Bohr の要請を〔水素に限らず〕もっと広い範囲の原子系に適用することが可能になった．この規則はいくつかの座標が循環変数になっているハミルトニアンをもつ系にはいつでも適用できるもので，〔循環変数に対応する〕それぞれの正準運動量をその運動の一周期にわたって座標について積分した量が h の整数倍でなければならないという形でいいあらわされる．この規則は水素の微細構造の計算や，二原子分子のスペクトルその他の問題に適用されてかなりの成功を収めた．

2-2 実際上の難点

前期量子論が遭遇した実際計算上の困難は，種々異なった面をもっていた．この理論は非周期系には適用できなかったし，またスペクトル線の強度についてはただ，定性的な，不完全な取り扱いを与えるに過ぎなかった．また光の分散の完全な説明を与えなかった．その上，その後間もなく実験技術の改良によって，ある種の二原子分子の回転スペクトルの問題のように，この理論では一意的でないしかも間違った答えしか得られない問題があることが示された．

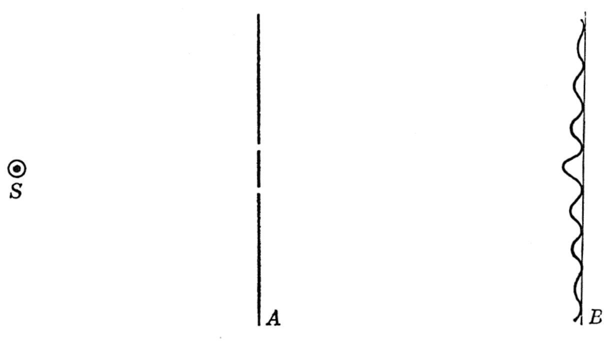
1923年に Bohr によって導入された対応の原理は原子系のある種の性質，特にスペクトル線の強度を考えるために，古典論を一つの極限の場合として利用することを

企図したものであった．このようなやり方で多くの成果が得られはしたものの，1920年代の初期において，量子論がその当時そのままの形では不十分なものであることは明白であった．

2-3 考え方の上での難点

以上に概略をのべた実際上の難点とは全く別に，前期量子論は基礎的な現象の説明を考え方の上で一貫して満足に与えることができなかった．定常状態では加速された電子が電磁輻射を放出する能力を失っているとしておきながら，一方では水素の原子核と電子との間の静電的な相互作用は効くはずであるとする理由を理解することは困難であった．定常状態間の転移に際しての輻射の放出吸収の機構もあいまいなものであったし，量子化の規則は確かに極めて有効ではあるが任意なものでもあった．さらに光の（放出吸収の際には粒子的で，その途中では波動的という）二重性格の仮定も自己矛盾であるように思われた．

これらの概念上の難点および新しい量子力学でこれらの難点を処理するやり方を明らかにするために第1図に略図がかかれている簡単な回折の実験をやや詳しく考えてみよう．光源Sが二つのスリットをもった壁Aを照らすと，感光幕B上に一つの回折像があらわれる．つまり叩き出された光電子の数が一番多いのが回折〔像〕の山の所にあたっている．ここで輻射は光源からスリットを通って感光幕に達する道筋の間では波動



第1図 回折の実験．Sからの光はAの二つのスリットを通ってBに回折像をつくる．

として振舞っていると考えられるが，しかしBから光電子を叩き出すときには光の量子すなわち光子の流れとして振舞っているわけである．ところで同様な実験を輻射〔光〕の代りに物質〔粒子〕を使って行なわせることもできるはずである．電子が（Aのスリットとに対応する）結晶から散乱されてつくる回折像は，（感光膜に対応する）ウイルソンの霧箱の中の電子の飛跡の分布として検知することができるはずである．したがって，〔この場合にも〕物質の波動と粒子の面が同一の実験であらわれることになる．

第1図に描かれている状況で，最初ちょっと考えたところでは回折像は二つのスリットを通り抜けてくる異なった光子間の干渉によるものとして，観測される事柄全体は粒子の描像で説明されるとしてよさそうに思われる．これが十分な説明になっていないことは，ある時刻に平均としてただ1個だけの光子がスリットと感光膜の間をとんでいる程度に光の強さをへらすことによって示される．この場合にもやはり回折像はでき，十分永い時間をかけてたまった多数の光子の分布としてあらわれる．したがって回折は単一の光子の統計的な性質であって，光子間の相互作用を意味するものではないと結論しなければならない．もしそうだとすれば，粒子像の観点からして，それぞれが予め二つのスリットの中の一方だけしか通りぬけられないはずの独立な光子の流れが両方のスリットが開いているときにのみあらわれる回折像をつくることができるというのはどうしてかということが問題になるであろう．あるいは問題を別の形であらわせば，光子が通り抜けない方のスリットの存在が，もしそのスリットがしまっておれば容易に到達しうるはずの感光膜上の部分に光子が到達するのを妨げることができるというのはどのようにしてであろうか？

2-4 量子力学の考え方

この問題では，光子が実際に二つのスリットの中の一方を通り抜けるという仮定が暗に含まれている．この仮定は，古典論または前期量子論の立場からは自然なものである．なぜならばこれらの理論では光子あるいは他の粒子は各瞬間にある特定の，確定しうる位置をもっていると見なされているからである．しかしながら，量子力学はこの仮定を捨てて，その代りに光子の位置ということは，実験が光子の位置の決定を含むときにのみ意味があると主張するのである．その上に，実験のこの部分は実験の残りの部分に影響を及ぼすであろうから，この部分だけを切りはなして考えることはできないことにな

る．したがって量子力学の考え方からすれば，§§2-3で述べた疑問は意味がないことになる．なぜならば上の実験では，光子が実際どちらのスリットを通ったかを決定する何等の装置も用意されていないのに，光子が二つのスリットの中の特定の一つを通過する（したがって他の一方のスリットを閉じておくことができるようにする）ものと仮定しているからである．

量子力学は次のように言うことによってこの事態を解決する．すなわちそれぞれの光子がどちらのスリットを通ったかを決める十分精密な検査が行なわれた場合には回折像はこわれてしまう（§4を見よ）．したがって，ここで論じられたような型の回折像をこわさないで，しかも各瞬間に決定しうる位置をもっている古典的な粒子としての光子（または電子）という通有の頭の中の像を断念することを覚悟しなければならないわけである．結局，任意の時刻における粒子の運動は前の時刻における運動から一義的に決定されるはずだという古典的な因果性もまた放棄されねばならない．このようにして余儀無いものとなった新理論は他の種々の点からしても非常な成功を収め，その結果上に述べたような古典的には不完全な記述を自然の一つの基本的な性質とみなさなければならなくなったのである．

3□不確定性と相補性

§2で大略を述べた回折実験のもっと定量的な議論に立ち入る前に，量子力学の理論の内容を定性的な言葉であらわしている二つの原理を考察することにする．ただしこの節ではこれらの原理の意味を説明するだけに限って，その妥当性についての議論は§4にゆずることにする．

3-1　不確定性原理

これらの中の最初のものは1927年にHeisenberg[1]によって発展させられた**不確定性原理** *uncertainty principle* である．この原理によれば，ある原子的な体系の振舞いを記述する物理的な変数の中である特定な組をとると，この組をつくる二つの変数の値を正確にかつ同時に指定することは不可能である．この種の組み合わせをつくる変数は

1) W. Heisenberg, *Zeits. f. Physik*, **43**, 172 (1927).〔この論文の邦訳は湯川・井上共編，「現代の科学II」（中央公論社，昭45）に収録されている.〕

ハミルトン形式の意味で互いに正準共役になっている：たとえば粒子の直交座標 x とそれに対応する運動量の成分 p_x, 粒子の角運動量のある方向の成分，たとえば J_z とそれに直角な (xy) 平面内での角変数 ϕ, あるいは粒子のエネルギー E とそれが測られる時間 t 等である．もっと定量的にあらわせば，不確定性関係は次のようになる：〔この種の〕二つの変数についての知識の不確定さの積は少なくともプランクの定数 h を 2π で割った程度でなければならない ($\hbar \equiv h/2\pi = 1.0545 \times 10^{-27}$ エルグ/秒).[1] したがって〔上にあげた例についていえば〕

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim \hbar \tag{3.1}$$

$$\Delta \phi \cdot \Delta J_z \gtrsim \hbar \tag{3.2}$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \hbar \tag{3.3}$$

(3.1) の関係の意味は次のようなものである．粒子の運動量のある成分を正確に指定することは，その時刻における粒子の位置の対応する成分についてのすべての知識を断念することなしには不可能である．あるいはまた粒子の位置をある方向で正確に局所的に限定してしまうことは，その方向の運動量成分についてのすべての知識を断念することなしには不可能である．またこの二つの場合の中間の場合として，相対応する位置と運動量の同時刻での測定値の不確定さの積は少なくとも $\hbar$ の程度の大きさになるということである．同様に (3.2) の関係式の意味としては，たとえば粒子の位置をある軌道に沿っての角度について正確にきめることはその時刻におけるその軌道の平面に垂直な角運動量の成分についてのあらゆる知識の放棄を伴っているといえる.[2]関係式 (3.3) は次のことを意味する．ある正確度 ΔE でエネルギーをきめるには少なくとも $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$ 程度の時間間隔を必要とするはずである．したがってある系がある時間 Δt 以上にはある特定の運動状態を維持できないとすれば，その系のエネルギーには少なくとも $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$ だけの不確定さが生じることになる．なぜならばこの場合 Δt はエネルギーをきめるために用いうる最大の時間間隔になっているからである．$\hbar$ が小さい量であるために不確定性原理のこのような意味が第一義的なものになってくるのは原子的な尺度の系に関連してであることはいうまでもない．

---

1) J. W. M. DuMond-E. R. Cohen, *Rev. Mod. Phys.*, **37**, 537 (1965).

2) ϕ は循環的な性格をもつため，(3.2) 式の議論については，いささか注意を要する．その点については M. M. Nieto, *Phys. Rev. Letters* **18**, 182 (1967) を見よ．

§12で分かることであるが，不確定性原理は理論の数学的な形式から直接得られるはずのものである．実際，最初にHeisenbergによって不確定性原理が導かれたのはこのようなやり方によるものである．

3-2 相補性原理

不確定性原理の含んでいる意味合いをもっと物理的な言葉で理解するために，Bohr[1)]は1928年に**相補性原理** ***complementarity principle*** を導入した．この原理によれば，原子的現象は古典力学によって要求される完全さでは記述できない；すなわち互いに相補って一つの完全な古典的記述をつくり上げている種々な要素の中のいくつかは，実際には相互に排他的であり，しかもこれらの相補的な要素はすべて，現象の種々の側面の記述には欠くことができないのである．実験家の立場からすれば，実験家が利用しうる物理的な装置は不確定性原理によって指定されている測定以上の正確な測定を行なおうと思ってもできないような性質をもっていることを相補性原理は主張するわけである．

このことは実験家の不手際あるいはその技術の不足と考えられるべきものではない．むしろ一組の正準変数の一方を正確に測定しようとする試みがなされるときは，いつでも一方の変数が，最初の測定と干渉し合うことなしには十分精密に計算されえない程度の変化をうけるということは一つの自然法則なのである．このことは古典論の事情と根本的に異なっている．古典論でも測定はやはり観測されている系に攪乱を与えはするが，この攪乱の大きさは計算できかつ勘定に入れうるものである．このようにして，相補性原理は原子的な体系の振舞いは系が観測される手段とは独立に記述されうるものであるとする古典的概念についての根本的な制限を典型的にあらわすことになっている．

3-3 実験についての制限

原子的な分野では，実験を行なうには不確定性関係と両立するそれぞれに異なった正確度で一組の正準変数をつくる二つの変数の測定が行なえるように計画された種々の実験装置の配列の中から選択しなければならないことになる．特に，それぞれが正準変数の組の一方を極めて正確に測定することになっている二つの極限な配列があるわけであ

1) N. Bohr, *Nature* **121**, 580 (1928)；"Atomic Theory and the Description of Nature," (Cambridge, London, 1934) 特にその第二部；*Phys. Rev.*, **48**, 696 (1935).

る．古典論によれば，これらの極限的な実験の配列は互いに相補う役割をする；つまり両方の結果は同時に得られうるとすれば，それらは，系の完全な古典的記述を与えるものなのである．しかしながら，量子力学では極端に相補的な実験は互いに排他的であって，それらを同時に行なうことはできないのである．

古典的な因果性の概念が原子的領域では失われるというのはこの意味においてである．原子の振舞いを記述する量子法則が完全に確定したものであるという意味では因果性は（原子的分野においても）存在している．しかし原子的な系の次々の状態の配置を古典的な言葉で記述しようとするとこれらの配置の間には因果的な関係は存在しないのである．

4⊡測定についての吟味

この節では，三つの極めて典型的な測定実験を，新しい量子力学の立場から考察する．初めの二つのものは，光学的方法によって一つの粒子の位置および運動量を決定するように工夫されている；第三のものは§2 の回折実験である．

4-1 位置決定の実験

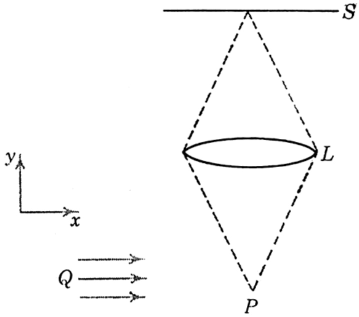
位置一運動量の決定を利用して，不確定性原理の妥当性の一つの特殊な例を考察することにしよう．この測定実験は，それに似た実験がこれまでにも粒子や輻射についての測定に関連して議論されてきたが，[1] それらの典型的なものになっている．ここでは，散乱光を使うある程度理想化された顕微鏡によって，物質粒子の位置および運動量ベクトルの x 成分が同時刻に決定されうる正確さを考えよう．

第2図に示されているレンズ L の最大分解能は（前同様に，実験的にか，または波動光学の理論を使って），位置の決定においては次の精度を与えることが知られている．

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \varepsilon} \tag{4.1}$$

ただし，λ はレンズに入射してくる輻射の波長で，ε はレンズによって P にはら

1) たとえば，W. Heisenberg, "The Physical Principles of the Quantum Theory" (University of Chicago Press, Chicago, 1930；邦訳：玉木他訳「量子論の物理的基礎」みすず書房 1954) の第Ⅱおよび Ⅲ章，D. Bohm, "Quantum Theory" (Prentice-Hall, New York, 1951；邦訳：高林他訳「量子論」みすず書房，1956) の第Ⅴ章を見よ．



第2図　スクリーンS上に像を結ぶようにレンズLによって焦点を合わせられた散乱光量子Qの一つをつかう粒子Pの位置決定の実験.

れる角の半分である．簡単のためにただ1個の光量子がスクリーンSに散乱されてくる場合を考える．レンズの有限の開きのために，光子が散乱される方向は正確には分からない．ところで（1.2）の方程式から，散乱されてからの光子の運動量はh/λであることが分かる.[1]　したがって光子の運動量のx成分の不確定性は，近似的に$(h/\lambda)\sin\varepsilon$となる.

光子と粒子の運動量のx成分は，散乱が起こる以前では正確に分かっているものとすることができる．なぜならば，その場合にはそれらの位置のx成分は分かっている必要がないからである．また，ここで考えている位置の測定は，顕微鏡に対しての粒子の変位を問題にしている限りでは，（粒子，光子および顕微鏡を含めた）系の全運動量が散乱の過程を通じて変化をうけるとしなければならない理由はない．したがって，散乱後の粒子の運動量のx成分の不確定性Δp_xは，光子のそれに対応する不確定性に等しいわけである.

$$\Delta p_x \sim \frac{h}{\lambda}\sin\varepsilon \tag{4.2}$$

（4.1）と（4.2）の二つの方程式を組み合わせると，散乱の直後では粒子に対してなしうる最大限度として

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \sim h \tag{4.3}$$

となることがわかる．このようにして，輻射の性質を具体的に考慮に入れると，粒子に対する不確定性関係（3.1）と一致する結果が得られることになる.

この実験はまた，相補性原理の立場からも考察することができる．観測される輻射の波長の選び方の相異が，〔実験装置の〕相補的な配列をつくるわけである；つまり，十分小さなλを使えば，散乱直後の粒子の位置の正確な決定が可能になり，大きなλを使えば運動量の正確な決定ができることになる.

---

1)　3頁の脚注2）を見よ.

4-2 運動量決定の実験

上に論じられた実験では，測定の以前では粒子の運動量は正確にわかっていると仮定して，それから位置の測定にとりかかることになっている．その結果わかったことは，測定によって，位置決定に関してある程度不正確な結果しか得られないのみでなく，運動量にもある程度不確定性が入り込んでくるということであった．

そこで，最初に位置が正確にわかっていて運動量を測定する別の実験を考えてみよう．後でわかるように，その結果はやはり測定によって運動量決定に関してある程度不正確な結果しか得られないのみでなく，位置にもある程度不確定性が入り込んでくることになる．〔この実験では〕，粒子として励起状態にある一つの原子を仮定することにする．この原子は，静止している時には振動数 ν_0 の光子を放出するものとする．この原子が観測者に向って v なる速さで運動しているということは，ドップラー効果によって，〔放出された光子の〕振動数が近似的に次式で与えられるような観測値を示すことに他ならない．

$$\nu \cong \nu_0\left(1+\frac{v}{c}\right) \tag{4.4}$$

したがって，速さ v は次式で与えられることになる．

$$v \cong c\left(\frac{\nu}{\nu_0}-1\right) \tag{4.5}$$

ところで，振動数 ν の測定によって運動量 mv を正確に測定するには比較的長い時間 τ を必要とする；そこで振動数決定の最小誤差 $\Delta\nu$ を次のように表わしておくことができる．

$$\Delta\nu \sim \frac{1}{\tau} \tag{4.6}$$

そこで，光子が放出される瞬間については τ だけの不確定性が伴うことになる；一方，この瞬間に原子の運動量は $h\nu/c$ だけ減り，その速度は $h\nu/mc$ だけ減るわけである．この結果，〔光子を放出した〕以後の原子の位置は

$$\Delta x = \frac{h\nu\tau}{mc} \tag{4.7}$$

だけ不確定になる．というのは，光子が〔この不確定な時間の範囲で〕遅く放出されればされるほど，原子はその速度を減じることなく遠くまで走ることができるわけだから

である．この位置の不確定性は，完全に τ の有限性のために生じてくるのである．もしも τ が零であった場合，したがって光子を放出した際の，〔原子の〕速度および速度の変化がわかっていた場合には，原子が各瞬間にどこにあるかがわかるはずである；要するに τ が有限であるために，いつ〔原子の〕速度が変化したのか，したがってその後の時刻にどこに原子があるのかがわからなくなるのである．

運動量の不確定性は（4.5）および（4.6）の関係を使って次のようになる．

$$\Delta p_x = m\Delta v \approx \frac{mc\Delta\nu}{\nu_0} \sim \frac{mc}{\nu_0\tau} \tag{4.8}$$

ここで考えているような非相対論的な場合には，$v/c \ll 1$ で，かつ（4.4）の方程式から $\nu \cong \nu_0$ であることがわかるから，したがって（4.7）および（4.8）の関係を組み合わせれば，（3.1）の最小の不確定性についての関係式が導かれることになる．

4-3 回折実験の分析

最後に，§2 の回折実験を不確定性原理が成り立つと仮定して，相補性原理の立場から分析する．この例では，古典的には互いに相補的であるはずの二つの対照的な装置の配列が考えられる．この二つの内の一つは第1図に示してある．〔第1図で〕A から B への距離は二つのスリット間の距離に比べて大きく，またスリット間の距離は光の波長に比べて大きいものと仮定されているから，回折像での強度の分布はよい近似で A のスリットを出た光子の角分布，したがって A 上での光子の運動量の y-成分を決定する．第二の配列は，第3図に示されているが，それによりそれぞれの光子が二つのスリットのどちらを通りぬけるかが決定され，したがって光子の y-座標についての知識が得られるようになっている．

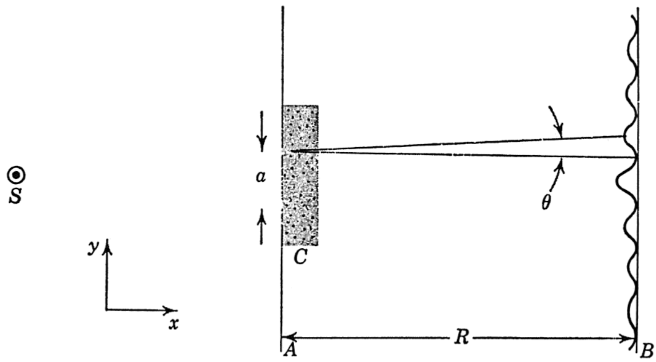
第二の配列ではそれぞれの光子は，スリットを通過する際に A に接近しておかれたいくつか指示物 C の中の一つをはじきとばすことによって記録される．そしてその際指示物に運動量の y-成分を与えるわけであるが，それには Δp_y だけの不確定さがあるとする．もしも多数のこのような光子からつくられる最後の回折像が，〔このような配列で生じる〕事態によって崩されないようにしようと思えば，指示物との衝突によって生じるある特定の光子に対する p_y の不確定性が B における回折像の極大の点から隣りの極小点までその光子をずらすのに必要なはずの p_y に比べて実質的に十分小さくなけ

ればならない．運動量 p_x の光子についてはこの条件は次のことを要求する．

$$\Delta p_y \ll \theta p_x \tag{4.9}$$

$R \gg a \gg \lambda$ という簡単な場合には，角度 θ は実験的に（または波動光学の理論から），光の波長 λ とスリットの間隔 a を使って次式で与えられることが知られている．

$$\theta = \frac{\lambda}{2a} \tag{4.10}$$



第3図　第1図の実験の配置に光子の指示物 C をつけ加えて修正したもの

この際，反跳をうけた指示物の y 座標の不確定性 Δy がスリットの間隔の半分に比べて小さくなければ，光子がどちらのスリットを通ったかがわかっていないことになる．したがって

$$\Delta y < \frac{1}{2} a \tag{4.11}$$

そこで，(4.9)（4.10）(4.11) の関係および (1.2) の方程式をつかえば次のような結論が得られる．すなわち，B における回折像を崩すことなしにそれぞれの光子がどちらのスリットを通過したかをきめうるという要求はそこに用いられた指示物に対する次の要求と同等になる．

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \ll \frac{1}{4} h \tag{4.12}$$

(4.12) の関係は不確定性関係 (3.1) と両立しないものであるから，結局回折像を崩さずにどちらのスリットを光子が通ったかを決定することは不可能であると結論してよい

ことになる．

4-4　回折実験の吟味

以上で分析した事情は不確定性および相補性という理論的な原理と位置決定および回折という実験的観測との間の密接な連関を示している．それは物質と輻射の実験的に観測しうる性質に関連して適用した場合の相補性原理の妥当性を具体的に表示していることになっている（この場合に，〔この原理は〕回折を観測するという実験と光子の位置を局所的に限定する実験という，互いに排他的でありながら古典的には相補的な〔二つの〕実験の間での選択によって表わされている）．なぜならば，この例の情況を記述する際に古典的な概念によっては必然的に導かれてくる詳細さの程度を固執しない限りでは，光子の描像に関して根本的な困難に遭遇することはないはずであることをこの例は示しているからである．

もちろん，それにしても実験的観測を説明するためには光子に対して不可思議な性質を与えることは必要である；たとえば以上の議論ではどのようにして個々の光子が回折像をつくるように互いに干渉し合うことができるかは示されていない．また一方では電磁波が感光膜から光電子を叩き出すのはいかにして可能かということも示されていない．このような点を明らかにすることは，この章の定性的な議論の範囲を越えており，量子力学の数学的な理論形式を必要とすることになる．[1)] しかしながら，量子力学の立場からの回折実験のこの分析では§2 であらわれた困難は除かれている：すなわちそれぞれの光子がスリットのどちらを通過するかを決定することができてしまえばいつでも回折像は消失するのである．[2)]

5 ▣ 空間および時間についての波束

運動量と波長との間の（1.2）の関係式は，光子および粒子のいずれに対しても成り立

---

1)　第XIV章で，どのようにして電磁場の理論を量子効果を含むように修正することができるかということが示されている．

2)　この節で論じられている事柄は次の書物の冒頭の諸章で，もっと徹底的に論じられている．R. P. Feynman and A. R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals," (McGraw-Hill, New York, 1965) および R. P. Feynman, R. B. Leighton and M. Sands "The Feynman Lectures on Physics" vol. III (Addison-Wesley, Reading, Mass, 1965；邦訳：井上訳「ファインマン物理学」第五巻，岩波書店，近刊)．

つことが実験的に知られている関係であるが，またそれによって局所化された物質粒子および輻射の量子を記述するために一ヵ所に集中した一群の波をつかうことができることを示唆している．以上の考え方をはっきりさせるために，空間座標 x, y, z および時間 t によって変化する一つの**波の振幅** *wave amplitude* いわゆる**波動関数** *wave function* を考えよう．この量 ψ は次の三つの基本的な性質をもつものと仮定する．第一にそれは自分自身と干渉し合うことができる．したがってそれは回折実験の結果を説明することができる．第二にその大きさは粒子または光子が存在すると思われる箇所では大きく，その他の場所では小さい．そして第三には ψ は単一の粒子または光子の振舞いを記述するものと考えられるべきものであって，いくつかの量子〔粒子または光子〕の統計的な分布を記述するものではないはずである．この最後の性質は，一つの物質または輻射の量子は他の量子とよりもむしろ自分自身と干渉するものであるという§2の結論からすれば本質的な要求であるわけである．この節では波動関数 ψ が x および t のみを含む一次元の場合についての定性的な議論に話を限ることにして，定量的な説明は第II章にゆずることにしよう．

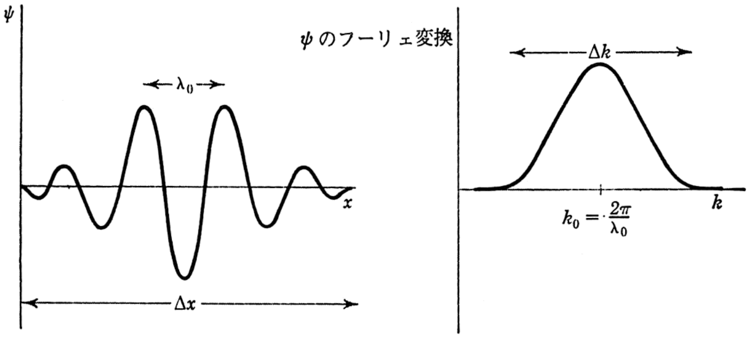
5-1　空間についての波束

一箇所に集中した一群の波，これを**波束** *wave packet* とよぶことにするが，その典型的な形は第4図aに示されている．ただし図の $\psi(x, t)$ は一つの特定の時刻 t に対して，x について描かれている．平均波長 λ_0 および波束の近似的な拡り Δx が図の曲線に書き入れられている．ここで ψ の x についてのフーリエ積分解析[1]が問題になる．というのはフーリエ積分解析によって ψ が種々の波長の連続な周期的な波からどのように構成されているかが示されるからである．ψ のフーリエ変換成分を略図的に**伝播数** *propagation number* $k=2\pi/\lambda$ に対してとった第4図bをみればこのことが示されている．

Δk を波束に附随した伝播数の近似的な拡りとすれば，標準的な数学的方法によって次の関係がなりたつことが示される．

$$\Delta k \geq \frac{1}{\Delta x} \tag{5.1}$$

1) たとえば P. M. Morse and H. Feshbach, "Methods of Theoretical Physics," (McGraw-Hill, New York, 1953) の§4．8を見よ．



(a)　　　　(b)

第4図　典型的な波束 $\psi(x)$ およびそのフーリエ変換成分の図

そこでもしも波長と運動量とを方程式（1.2）のようにして関係づけることにすれば，拡り Δk は運動量の拡り

$$\Delta p = \Delta\left(\frac{h}{\lambda}\right) = \frac{h}{2\pi}\Delta k = \hbar\,\Delta k \tag{5.2}$$

に対応することになる．方程式（5.1）を方程式（5.2）と組み合わせて

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar \tag{5.3}$$

となる．これは不確定性関係（3.1）と一致する．このようにして，物質および輻射の一つの量子の位置および運動量に対する不確定性原理は，波束による記述と方程式（1.2）から直接導かれてくるのである．

5-2　時間についての波束

同じようなやり方で，波束の代表的な点 x をとって ψ の t についての変化の仕方を調べ，ψ がどのように種々の振動数 ν の連続的な調和振動からつくられているかを示す（ψ の）時間についてのフーリエ変換成分を求めることができる．この場合には ψ の時間についての拡りと ψ の時間についてのフーリエ変換成分の振動数についての拡りとの関係は

$$\Delta t \cdot \Delta\nu \gtrsim \frac{1}{2\pi} \tag{5.4}$$

となる.

方程式 (1.2) で量子の運動量を波長とむすびつけたのと同様なやり方で，量子のエネルギーをそれをあらわす波の振動数と関係づけることができれば，方程式 (5.4) は不確定原理と対応させることができるものである．この結びつきを方程式 (1.1) によってとることにしよう：

$$E = h\nu \tag{5.5}$$

この方程式は第1節の実験についての議論では光子の場合について成り立つことが推論されたものである．そこで方程式 (5.4) を方程式 (5.5) と組み合わせれば不確定性原理 (3.3) が得られる.

方程式 (5.5) が輻射に対してのみならず物質に対しても同様に成り立つという仮定をうけ入れやすくするには，質量 m，運動エネルギー E，運動量 p の非相対論的な粒子をあらわす波束の群速度[1] を計算してみればよい．ただし E および p には方程式 (1.2) および (5.5) によってそれぞれに対応する λ および ν が与えられるとする．波束の中心の速度である群速度は次のものに等しい.

$$\frac{d\nu}{d(1/\lambda)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d(p^2/2m)}{dp} = \frac{p}{m} \tag{5.6}$$

この結果は速度に対する古典論の表式と一致している．このことは，波束の大きさおよびその内部構造を無視することが可能であるような状況では，方程式 (5.5) を併用した単一粒子の運動の波束による記述は古典論の記述と一致するということを示している.

5-3 理論の波動論形式

以上でわかったことは次の通りである．もしも実験的に推論された関係式 (1.2) および (5.5) を利用するとすれば，物質または輻射の量子を不確定性原理と一致するように波束によって表現することができ，この波束は重ね合わせて干渉を起こさせることもできればまたその大きさは〔粒子の〕適当な局所化の一つの目安をも与えることになっている．そこで波動運動の数学的な分析に基づいて，ある定量的な理論形式を作り上げることが可能になる．このことは第Ⅱ章で物質に対して実行されるはずである．その際，本章で大略を述べた物理的な原理を指導原理として用い，かつ常にすべての計算の結果

1) M. Born，前掲書88頁および330頁（邦訳書，88頁および付録Ⅺ）を見よ.

が適当な極限をとれば対応する古典論の計算結果に帰着することを要求することにする．この要求は§2 で述べた Bohr の対応原理を別のいい方で述べたものに他ならない．合理的に完全になった量子論が存在している現在では，この原理によって理論形式が適当な古典論的極限をもつことを保証されるという点が主として問題になるのであるが，しかし現在でも新しい計算を行なったり，理論の境界を拡張する際にはこの原理は発見法的な価値をもちうるものである．

ちょっと考えれば，次の4つの章で物質の記述に波動論形式を一方的に用いることは§1 で論じた粒子—波動の二重性という観測事実と矛盾し，したがって相補性原理に反するものではなかろうかと考えられるかも知れない．しかしながら，この場合はそうなっていない．というのは，実際この理論形式から，物質のすべての測定しうる性質についての説明が得られるのである．これらの性質の中には，たとえば粒子の霧箱の中での飛跡の生成も含まれている．要するに§38 で示されるように，1個の物質粒子を運動量が確定した，したがって位置は完全に不定な波動関数であらわすとすると，〔この粒子が〕霧箱のガスの2個またはそれ以上の分子をイオン化する確率は，これらの分子が〔粒子の〕運動量ベクトルに平行な直線の極く近傍に存在しない限り無視しうるほど小さいことになる．

強調しておかねばならないことは，これらの注意した点はこの節でとられた型の波動関数がたくさんの粒子の統計的分布をあらわしているものでなくただ1個の物質粒子を表現していると常に解釈される場合にのみ成り立つということである．1個以上の粒子を記述したいと思えば，それらのすべての座標を含む波動関数を使わねばならない．光の量子を同様に解析的に記述することは第XIV章で定量的にとり上げられるはずであるが，その場合の議論の進め方は幾分異なってくる．このことは主として光子が（ここで考えている粒子と異なって）物質によって放出されたり，吸収されたりすることができ，その結果その個数が一定していないことのためである．つまり光子の波動関数は変化する個数のパラメーターを含まねばならないことになるわけであるが，そのような事情はここでの議論ではさけておく方がのぞましい．

問　　題

1. 第1表で参照した種々の実験をそれぞれ簡単に記述し，その解釈を合わせて述べよ．

2. Davisson-Germer および Thomson の実験と，粒子の飛跡観測用の Wilson の霧箱の用法

について簡単に述べよ.

3. Stern-Gerlach の実験での銀の原子のビームは 1200°C の炉におかれた銀から蒸発する原子を集束してつくられる. ビームが1メートル走るものとして, 不確定性原理を用いて検知器においてつくられうる最小のスポットの大きさはどの程度であるかを求めよ.

4. 1オンスの小銃弾が標的に達するのに 0.5 秒かかるとする. 弾丸を質点とみなし, かつ空気抵抗および地球の運動を無視し, 射撃の際のねらいおよび発射は最上の条件で行なわれるとして, 標的での連続的な射撃点の拡りの大きさがどの程度になるかを求めよ.

5. 真空中で完全に弾性的なピンポン玉を固定された同半径の完全に弾性的な球に対し, 半径の10倍の高さから落したとする. 地球の運動の効果を無視し, かつピンポン玉が最適の条件ではなされるものとして, この玉が固定球に対してその上で行ないうると期待されるはずみの最大回数を算定せよ.

6. Frank-Herz の実験では, ある原子の特定の準位を励起するために単一のエネルギーの電子のビームが用いられる. もしもこの準位が基底状態へおちる輻射によって短い寿命しかもたないものであれば, 励起状態をつくるためにエネルギーを失って非弾性的に散乱される電子は, すべてそろって同じ最終エネルギーをもつとは期待されないはずであることを示せ. もしも励起準位が大体 10^{-10} 秒持続するものとすれば, 電子のエネルギーの拡りの大きさは電子ボルトで測ってどの程度になるかを求めよ.

7. 三つの不確定性関係 (3.1), (3.2), (3.3) の間に何等かの関連があるかを考え, 議論せよ.

8. (5.6) の方程式の左辺にあらわれている群速度の表式を導け.

第Ⅱ章　Schrödinger の波動方程式

この章およびそれにつづく数章では，一つのポテンシャルエネルギーで表わすことのできるある外力場の中を一つの粒子が運動している場合を，非相対論的に取り扱うことにする.[1] この章では，この種の運動を **Schrödinger の波動方程式** ***Schrödinger wave equation*** とよばれる微分方程式によって定量的に記述することを調べ，それを簡単な一次元の問題に応用する．その際，波動方程式の構造，その解の境界条件と連続条件，またその物理的意味，といったものに関してはいろいろの仮定が必要になってくる．この章および次の章では，この種の仮定が極めてもっともなものであることを示すのに，これらの仮定を実験的な結果，主として物質粒子の回折実験を取り扱う際の条件および量子力学に対してある古典論的な極限が存在するということについての条件と関連させて論じる．ただし，実験の考察から一義的に理論形式を構成するというやり方は全然とっていない．言うまでもなく，理論の正否を最後的にきめるのは，理論形式自身がその内部に矛盾を含まないかどうか，またそれから出てくる結論が個々の実験の測定と首尾よく一致するかどうかということでなければならない．こういう例をいくつか第Ⅳ章および第Ⅴ章で取り扱うことにしよう．

6□波動方程式をつくること

この節では，§5 の波動振幅の性質を一般化して，Schrödinger の波動方程式の形を求める．そして波動方程式およびその解のいくつかの性質をしらべることはこの章の残りの数節でやることにする．

---

1)　これは本当の状況に対する一つの理想化に他ならない．本当は特殊相対性が考慮されねばならないし，いくつかの粒子が創り出されたり，消滅したりすることが起こりうるし，相互作用もポテンシャルによって記述することができない．にもかかわらず，原子，分子，凝縮系および原子核を取り扱う際に，この種の理想化は，殊の他に有効なのである．

6-1　伝播する調和振動波

§5 では一次元の波動関数 $\psi(x,t)$ の性質を定性的にしらべておいたが，ここではまずそれをもっと定量的に調べていくことにしよう．とぎれることなく伝ってゆく調和振動波の波長と運動量，およびエネルギーと振動数の間には，それぞれ（1.2），（5.5）の関係があることは§5 で分かったことであった．この二つの関係を普遍定数 $\hbar=h/2\pi$ を使って書き直すと次のようになる．

$$p=\hbar k, \qquad k=\frac{2\pi}{\lambda} \tag{6.1}$$

$$E=\hbar\omega, \qquad \omega=2\pi\nu \tag{6.2}$$

波動関数 $\psi(x,t)$ が全く位置は指定することはできないが，x 軸の正の方向に正確に知れている運動量 p と運動エネルギー E で走っている粒子を表わしているとすれば，その形は

$$\cos(kx-\omega t),\quad \sin(kx-\omega t),\quad e^{i(kx-\omega t)},\quad e^{-i(kx-\omega t)} \tag{6.3}$$

のうちのどれか一つ，またはその一次結合であると考えておいてよいことになる．こういう形が考えられるということは，Davisson と Germer の回折実験とか Thomson の回折実験とか（§1 参照），または近似的に伝播数が k，角振動数が ω になっている波束の群速度が運動量 p，エネルギー E で古典論的な自由運動をしている粒子の速度と等しいということなどから導かれるのである（方程式（5.6）参照）．

6-2　波動方程式の必要性

連続な調和振動波という最も簡単な問題以上に議論を先に進めるには，調和振動波だけではなく，もっと複雑な波もその解としてもつような方程式を見つけるのが望ましいわけである．この点をはっきりさせる手助けとして，物理学のもっと親しみ深い分野から一つの例をとるのがよいだろう．今，気体内を伝わる三次元空間での音の波を考えるとすれば，この音の波が剛体球で散乱される問題の解はいろいろの方向に調和振動をしながら進んでゆく平面波を重ね合わせてつくることもできるが，球面極座標を使って音波を表わす微分方程式を直接解く方がはるかに簡単なのである．気体の温度が場所によって変わってくる場合には，このような微分方程式を使わないでは，議論を先にすすめることは一般論としても不可能になる．音波に対して基礎になる正しい方程式は気体の力学的性質を考えることによって見つけ出すことができる．§5 の波動関数を解として

もつような方程式の場合にはこれと事情が異なってはいるが，やはりこの場合でもこの種の方程式の形を見つけ出すことが絶対不可欠であることにはかわりはないのである．この種の方程式が必要なことは，波動関数が外力の影響の下で運動する粒子を記述せねばならない場合を考えればさらにはっきりするだろう；この事情は丁度非均質な気体の中を音の波が進む場合にあたっているわけである．そこでまずψに対する方程式を見つけ出して，それを見出した後は，この方程式を（6.3）の調和振動波の形よりも，もっと基本的な波動関数の属性とみなすことにしよう．

この方程式は二つの基本的な性質を備えていなければならない．第一に線型であること．というのは，（三次元での）干渉効果を表わさせたり，波束をつくらせたりするのに解の重ね合わせができるようにするためである．第二に，方程式の係数はただ$\hbar$とか，粒子の質量とか荷電とかいった定数のみを含み，粒子の運動のある種のパラメーター（運動量，エネルギー，伝播数，振動数）を含んでいないこと．この第二の要求に対する理由は次のようなものである．つまりこうしたパラメーターのいろいろ異なった値に属している方程式の解を重ね合わせてもう一つの解をつくることができる可能性をのこしておきたいのである；そうだとすると，そのようにしてつくった一般的な波動関数はパラメーターをそれ自身の構造の中に含んでいるような方程式の解にはなり得ないからである．微分方程式は一番取り扱いやすいものであるから，まず最初にこの型の方程式を調べてみるだけの価値があろう．その結果，上の二つの要求は一つの微分方程式によって満たされることがわかるのである．

すべてこういうことを心にとめた上で，最初に最もなじみ深い一次元の波動方程式，たとえば弦の上の横波とか気体中の音の平面波とかを表わすものを調べることにしよう．γ を波の速度の自乗に等しいとすれば，これらの場合の波動方程式は

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\gamma\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{6.4}$$

となる．（6.3）の形を方程式（6.4）に代入すれば，（6.4）で記述される粒子の質量を m としたとき

$$\gamma=\frac{\omega^2}{k^2}=\frac{E^2}{p^2}=\frac{p^2}{4m^2} \tag{6.5}$$

の関係がある場合，かつその場合に限って（6.3）の各々の調和振動波，したがってその一次結合も共に（6.4）の微分方程式を満足することがわかる．しかし微分方程式の

係数としてのこの γ は，(6.5) の方程式の構成から明らかなように運動のパラメーター (E とか p とか) を含んでいる；したがってこの微分方程式 (6.4) は採用できないことになる．

6-3 一次元の波動方程式

さらに適当な方程式を探していく際には，(6.3) のような波動関数を x について微分すると，その結果は一般にもとの関数に k をかけたことになり（ときにはそのほかに sin と cos が入れ代わることもあるが），t について微分すると ω をかけたことになるということを注意しておくと都合がいい．ところで，$E=p^2/2m$ という関係は $\omega=\hbar k^2/2m$ という関係と同等であるが，これらの関係と今注意しておいたことから，求めている微分方程式は t に関しては一階の微係数，x に関しては二階の微係数を含んでいるという見当がついてくる．そこで

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\gamma\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{6.6}$$

とする．(6.3) の波動関数をこれに代入してみると，始めの二つはこの方程式の解にはなっていないが，常数 γ を適当に選べば後の二つのどちらかを解になるようにすることができる（しかし，この二つが共に同時に解となることはできない）．今，特に

$$\gamma=\frac{i\omega}{k^2}=\frac{i\hbar E}{p^2}=\frac{i\hbar}{2m} \tag{6.7}$$

とすると，(6.3) の第三の波動関数が (6.6) を満たす．しかも方程式 (6.7) で与えられる γ の値は，ただ $\hbar, m$ という常数だけを含むことになる．

こうして質量 m の自由粒子に対する Schrödinger の波動方程式[1]の一次元の形が導かれるわけである．それは (6.6)，(6.7) から

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{6.8}$$

と書ける．(6.3) の第三の関数，つまり調和振動的な解に対して，左辺は $E\psi$ に，右辺は $(p^2/2m)\psi$ になるという点に (6.8) という特別の形の方程式の意味があるのであって，解が $e^{i(kx-\omega t)}$ という複素量であることはそれ自身では理論の形式上の欠陥であ

1) E. Schrödinger, *Ann. d. Physik*, **79**, 361, 489 (1926)；**81**, 109 (1926)．ただしここの取り扱い方は Schrödinger の最初の導き方とは少し違っている．

るといったわけのものではない．むしろ物理的観測について予想されるすべての結果が，実数で表わされるということは確かめておかねばならないはずであり，このことが ψ のより立入った解釈に対しある条件を課すものになってくるのである．

6-4　三次元への拡張

今までの一次元的取り扱いは，直ぐに三次元へ拡張することができる．それには（6.1）の方程式を書き直して

$$\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}, \qquad k=|\mathbf{k}|=\frac{2\pi}{\lambda} \tag{6.9}$$

とするのが自然であるが，この $\mathbf{k}$ は**伝播ベクトル** ***propagation vector*** とよばれる．同様に $\mathbf{r}$ を粒子の位置のベクトルとすれば，（6.3）の第三の関数は

$$\exp i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t) \tag{6.10}$$

となる．そうすると，（6.8）を導くのに用いた議論をそのまま拡張して，波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ で表わされる自由粒子に対する三次元の Schrödinger 方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi \tag{6.11}$$

となる．

（6.9）の方程式を（6.11）および古典論でのエネルギー方程式

$$E=\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{6.12}$$

と比べてみると，少なくとも自由粒子については，エネルギーと運動量とは波動関数 ψ に作用する微分演算子として次のように表わすことができるということが示唆される．

$$E\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \qquad \mathbf{p}\to -i\hbar\nabla \tag{6.13}$$

§7，8，10，11の各節での議論から，この表わし方は粒子が自由でない場合にも正しいものだということが示されるはずである．

6-5　外力を含む場合

次の問題は自由粒子の波動方程式（6.11）を粒子に作用すると考えられる外力の影響をも含むように拡張することである．今のところ，これらの外力は一つの力 $\mathbf{F}$ に合成することができ，この $\mathbf{F}$ は一つの実関数であるポテンシャルエネルギー V から導くことが

できるという性質をもっていると仮定しておこう（静電力，重力，おそらくは核力もこの種の性質をもつ）．すなわち

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -\nabla V(\mathbf{r}, t) \tag{6.14}$$

とする．（6.11）の方程式の構造を推定する際に，エネルギーと運動量との間の古典論の関係を用いて推論したのと丁度同じように，今度もそれに相当した古典的関係で外力を含んでいるものから出発するのがよいように思える．これはポテンシャルエネルギーを使えば簡単に表わせて

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \tag{6.15}$$

となる．ただしこの場合Eは全エネルギーで，右辺の第一項，第二項がそれぞれ粒子の運動エネルギー，ポテンシャルエネルギーになる．

Vは$\mathbf{p}$やEとは関係のないものだから，（6.15），（6.13）の方程式から示唆されるように，（6.11）を一般化すれば次のようになるだろう．

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\mathbf{r}, t)\psi \tag{6.16}$$

これが（6.14）で与えられる外力場の中での質量mの粒子の運動を記述する Schrödinger の波動方程式である．[1] 方程式（6.16）の導き方には自由粒子の方程式（6.11）を導き出した場合と同様に高い信頼度があるとは主張できないのであるが，その点は次の節のより進んだ議論によってもっとはっきりしてくるであろう．いうまでもなく，この波動方程式（6.16）が正しいものであり，役に立つものであるということを実際に証拠立てるのは，その解と個々の場合についての実験とが一致するということである．

7□波動関数の解釈

さて，波動方程式（6.16）の解である波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ はポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{r}, t)$ をもつ質量 m の一つの粒子の振舞いについての量子力学的に完全な記述を与えるものであり，したがって古典的には軌道 $\mathbf{r}(t)$ に相当したものであると仮定しておこ

1） 波動関数の時間についての発展の仕方を，粒子のすべての可能な径路についての積分に関係させる見方も可能である；この点については R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.*, **20**, 367 (1948) および R. P. Feynman と A. R. Hibbs の著書 "Quantum Mechanics and Path Integrals" (McGraw-Hill, New York, 1965) を見よ．

う．今までのところ，波動関数の解釈の手引きとして役に立つのは，ただ波動関数は粒子が確かに存在しそうな場所では大きく，他の場所では小さいということだけである．だが，この点については，波動関数に対するさらに詳細な陳述で補われねばならない．この種の陳述は，§3 で論じられたように，〔対象にしている原子現象の〕本性からして許される限り最大限度の量の知識を ψ から抽出してくることを可能にするものでなければならない．波動方程式の構成についての議論と同様に波動関数の解釈の正否も，結局その議論自身が論理的に矛盾がないかどうかということおよび実験結果とつきあわせてみることによって判定されねばならないはずである．

7-1　統計的解釈

“存在しそうな”という先のパラグラフの言葉と，§3 で論じたことから，統計的な用語で ψ を解釈することが必要であることが示されている．そこで合同な，かつたがいに独立で，重なり合っていない非常に多数の空間領域を想像しよう．各領域の大きさはそれらの中での粒子の運動が物理的に興味あるあらゆる特性をそなえうるために十分な程度に大きいものであり，かつポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{r}, t)$ の下での粒子の振舞いは同一の波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ で記述されるものとしておく．ただし $\mathbf{r}$ はある特定の領域についてのそれぞれの場合に応じて，その領域の原点からとったものである．さらに次のように仮定する．つまり物理的に意味のある量，たとえば位置や運動量やエネルギーを（それらの測定の行なわれる時刻を指定することができるとして），ある時刻 t で測定した場合一般にその測定結果の数値は各領域のすべてを通じて同一であることはなく，むしろ一つの確率関数で表わされるような測定値の分布が得られるであろうと仮定する．この仮定は Born[1] によるものである．

たとえば，§5 で見たように，位置測定の結果は波動関数の零でない範囲の拡がりの程度で不確定になっていると考えなければならない．だから ψ をその領域の原点からとったある特定の位置に粒子を見出す確率の目安とみるのは自然である．しかし，この確率というものは実数であり，負になってはならないのに，一方 ψ は一般には複素量である．そこで ψ とそれに複素共役な ψ^* との積が**位置の確率密度** ***position probability density*** であると仮定する．すなわち

1) M. Born, *Zeits. f. Physik*, **37**, 863 (1926) ; *Nature*, **119**, 354 (1927).

$$P(\mathbf{r},t)=\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)=|\psi(\mathbf{r},t)|^2. \tag{7.1}$$

このことはつまり，その一つ一つがそれぞれ一個の粒子を表わす波動関数 $\psi(\mathbf{r},t)$ で記述されている多数の独立な粒子について，位置を正確にきめる測定を数多く行なったとき，一点 $\mathbf{r}$ の近傍の体積要素 $dx\,dy\,dz$ の中に粒子を見出す確率が $P(\mathbf{r},t)dx\,dy\,dz$ であるということを意味している．

7-2　ψ の規格化

粒子をいま考えている一つの領域内部のどこかしらに見出す確率は 1 に等しいはずである．したがって方程式（7.1）で考えている一つの領域全体について積分してしまった場合には

$$\int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d^3r=1 \tag{7.2}$$

となるように波動関数が**規格化されている** *normalized* ことを（7.1）は含みとしてもっているわけである；ただし d^3r は体積要素 $dx\,dy\,dz$ である．もし ψ が §5 で調べたような型の波束なら，（7.2）の積分は収斂し，その値が 1 になるように ψ に適当な常数係数をつけておくことにすればよい；もちろんこのような規格化を行なってもそれは ψ についての斉次式 (6.16) の解であることには変わりはない．ところが，(6.10)で与えられるような，（7.2）の積分を無限に大きい体積について行なうとその結果が収斂しない波動関数が存在する．こういう波動関数については特別に考えてみなければならないので，§10 および §11で調べることにする．さしあたり，こういう波動関数が定義されている空間の領域は任意に大きくとれるが有限のものであり，この領域についてとった（7.2）の積分は収斂し，したがって常に規格化が可能であると考えておくことにする．

ψ を規格化してもそれが波動方程式(6.16) を満たしているとしてよいためには，ψ を規格化する常数は時間に無関係でなければならない．つまり，もし（7.2）の方程式がある時刻に成り立っているなら $|\psi|^2$ が位置の確率密度を表わすという解釈から，規格化の積分は時間に無関係でなければならない．実際にそうなっていることは，ある固定した体積 Ω でとった P の積分を時間で微分することによって示すことができる．

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega P(\mathbf{r},t)d^3r=\int_\Omega\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right)d^3r$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\int_\Omega [\psi^*\nabla^2\psi-(\nabla^2\psi^*)\psi]d^3r$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\int_\Omega \nabla\cdot[\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi^*)\psi]d^3r$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\int_A [\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi^*)\psi]_n dA.$$

ここで $\partial\psi/\partial t$ を (6.16) で，$\partial\psi^*/\partial t$ を (6.16) の複素共役を使って置き換えてある．最後の積分は，部分積分を行ない（Green の定理を使って）得られたもので，A は積分領域の境界面であり，$[\ \ ]_n$ は括弧の中のベクトルの面積要素 dA の外向きの法線方向の成分を意味する．[1)]

今，ベクトル $\mathbf{S}(\mathbf{r},t)$ を次のように定義する．

$$\mathbf{S}(\mathbf{r},t)=\frac{\hbar}{2im}[\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi^*)\psi] \tag{7.3}$$

これを使って

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega P(\mathbf{r},t)d^3r=-\int_\Omega \nabla\cdot\mathbf{S}d^3r=-\int_A S_n dA \tag{7.4}$$

となる．波束の場合には ψ は遠方では零になり，規格化積分は収斂するので Ω を全空間にとればこの表面積分は明らかに零になる．方程式 (6.10) のような型の波動関数では ψ が境界面上で零になるかまたは周期的構造をもつような有限な領域 Ω を使って ψ を定義しておくことができる（§10 参照）．これらの場合はすべて (7.4) の表面積分は零になるので，その結果 (7.2) の規格化積分は時間がたっても変わらないということが容易に示される．

7-3 確率の流れの密度

(7.4) の結果を導いた手つづきから，

$$\frac{\partial P(\mathbf{r},t)}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{S}(\mathbf{r},t)=0$$

という微分的な関係が同時に成り立っていることがわかる．この式は，湧き出しや吸い込みがない場合に密度 P，流れの密度 $\mathbf{S}$ をもつ流体の流れの保存に関連したおなじみの

1) ψ^* が ψ の前にくるような各因子の配列順序を採用するのが便利である．（以下の (7.7) についての議論を参照のこと）．

形式になっている．その意味で方程式 (7.3) によって与えられている $\mathbf{S}(\mathbf{r}, t)$ を**確率の流れの密度** ***probability current density*** と解釈することは合理的であろう．こう解釈すれば，力が働いているときでも，(6.13) のように $-i\hbar\nabla$ を運動量と見なすということがますます確からしくなる．というのは，そうすれば $(\hbar/im)\nabla$ は速度の演算子であり，明らかに

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = \left(\psi^* \frac{\hbar}{im}\nabla\psi\right) \quad \text{の実数部分}$$

となるからである．

このSの解釈は示唆に富むものではあるが，Pに対してと同じ意味での直接測定がSにはできないということははっきりとさせておかねばならない．つまり $\mathbf{S}(\mathbf{r}, t)$ は，時刻 t で，ある点 $\mathbf{r}$ を流れる粒子束 (particle flux) の測定平均だというのは誤りに導くものである．というのは，ある局所での粒子束の平均を測定するということは，位置と速度（速度は運動量と同等）とを同時に極めて正確に測定することを意味しており，これは (3.1) の不確定性関係と矛盾してくるからである．にもかかわらず，Sを流束のベクトルと考えることが有益な場合が少なくない．ことにそれが $\mathbf{r}$ にほとんど関係しないか，または全然無関係で，流束という概念の有用さをそこなわさずに速度を正確に決定できるときには役に立つのである．

7-4 期　待　値

位置の確率密度 $P(\mathbf{r}, t)$ が存在することを使うと，粒子の位置ベクトルの**期待値** ***expectation value*** とよばれるものを計算することができる．それは，粒子の位置ベクトルのそれぞれの成分の重みをつけた平均をそれぞれの成分としてもつベクトルとして定義されている．期待値というのは，ただ一回の測定の結果に対しての（確率論的な意味で）数学的な予期を示すものであるが，また別の言い方をすれば，この節の始めに論じたような型の数多くの独立な系について多数回の測定を行なったときの結果の平均でもある．ψ が規格化されているとすれば，$\mathbf{r}$ の期待値は次のように表わされる．

$$\langle\mathbf{r}\rangle = \int \mathbf{r}P(\mathbf{r}, t)d^3r = \int \psi^*(\mathbf{r}, t)\mathbf{r}\psi(\mathbf{r}, t)d^3r \tag{7.5}$$

これは

$$\langle x\rangle=\int\psi^*x\psi d^3r,\qquad \langle y\rangle=\int\psi^*y\psi d^3r,\qquad \langle z\rangle=\int\psi^*z\psi d^3r$$

の三つの方程式と同等である．(7.5) で ψ も P も t の関数であり，空間の座標は積分されてしまっているから，期待値は時間だけの関数である．

物理的に意味をもつ他の量の期待値も，この量が粒子の座標 $\mathbf{r}$ だけの関数であるならば，同じようにして求めることができる．たとえば，ポテンシャルエネルギーの期待値は

$$\langle V\rangle=\int V(\mathbf{r},t)P(\mathbf{r},t)d^3r=\int\psi^*(\mathbf{r},t)V(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r \tag{7.6}$$

となる．しかし，運動量とかエネルギーとかいう量についてこういう計算が可能なためには，まずそれらを $\mathbf{r}$ と t で表わしておかねばならない．この目的に (6.13) の微分演算子の表示が使えるものと仮定する．さらに，この仮定が正しいことを§10（エネルギー），および§11（運動量）でエネルギーおよび運動量のそれぞれに対応する確率関数を使って確かめることにしよう．さしあたって直ぐに疑問になることは，こういう微分演算子を位置の確率密度 P とどんなふうに関連させるべきかということである．

この疑問に答えるために，期待値が古典論のエネルギー方程式 (6.15) に類似の

$$\langle E\rangle=\left\langle\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right\rangle+\langle V\rangle$$

という関係を満たすはずだというもっともらしい要求をもち込むことにしよう．微分演算子を使って表わすと，これは

$$\left\langle i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right\rangle=\left\langle-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right\rangle+\langle V\rangle \tag{7.7}$$

と書ける．期待値が ψ に演算子を作用させ，その左側からさらに ψ^* をかけるものとして一般の場合に定義されるときに限って，方程式 (7.7) と波動方程式 (6.16) の間に矛盾を生じないことは明らかである．したがって，たとえば

$$\langle E\rangle=\int\psi^*i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}d^3r,\qquad \langle\mathbf{p}\rangle=\int\psi^*(-i\hbar)\nabla\psi d^3r \tag{7.8}$$

となる．(7.8) の後の関係は (7.5) と同じく次のような三つの成分に分けた方程式と同等である．

$$\langle p_x\rangle=-i\hbar\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}d^3r,\qquad \langle p_y\rangle=-i\hbar\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial y}d^3r$$

$$\langle p_z\rangle = -i\hbar\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial z}d^3r$$

7-5 Ehrenfest の定理[1]

ポテンシャルエネルギーが波束のひろがりの範囲では無視しうる程度にしか変化しないという場合はいつでも，その波束の運動がそれに対応する古典的粒子の運動と一致するはずだという予想は合理的なものである．波束の“位置”とか“運動量”とかのベクトルがこれらの量の荷重平均，すなわち期待値を意味するとすれば，古典的運動と量子的運動が常に一致するということを示すことができる．波束の“速度”成分とは，位置成分の期待値の時間的変化の割合となるわけである；$\langle x\rangle$ はただ時間のみに関係し，また (7.5) の被積分関数中の x は積分変数であるから，この割合は

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{d}{dt}\int\psi^* x\psi d^3r = \int\psi^* x\frac{\partial\psi}{dt}d^3r + \int\frac{\partial\psi^*}{dt}x\psi d^3r$$

となる．(6.16) の波動関数の時間についての微係数とその複素共役とを代入し，さらに V が実の量であるという仮定をこの際にもひきつづいて採用することにすれば，V を含む項は打ち消し合って，この表式は簡単化することができる．すなわち，

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle x\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\left[\int\psi^* x\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi\right)d^3r\right.\\ &\qquad\left.-\int\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^*\right)x\psi d^3r\right]\\ &= \frac{i\hbar}{2m}\int[\psi^* x(\nabla^2\psi) - (\nabla^2\psi^*)x\psi]d^3r\end{aligned}$$

後の方の積分で部分積分を使うと

$$\int(\nabla^2\psi^*)x\psi d^3r = -\int\nabla\psi^*\cdot\nabla(x\psi)d^3r + \int_A(x\psi\nabla\psi^*)_n dA$$

ところが波束は遠方では存在しないから，無限遠の境界面 A の上での $x\psi\nabla\psi^*$ の法線成分は零となる．もう一度部分積分をやると，今度も表面積分は消えて，その結果は

$$\int(\nabla^2\psi^*)x\psi d^3r = \int\psi^*\nabla^2(x\psi)d^3r$$

となる．したがって

1) P. Ehrenfest, *Zeits. f. Physik* **45**, 455 (1927)

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle=\frac{i\hbar}{2m}\int\psi^*[x\nabla^2\psi-\nabla^2(x\psi)]d^3r$$

$$=-\frac{i\hbar}{m}\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}d^3r=\frac{1}{m}\langle p_x\rangle \tag{7.9}$$

$\langle x\rangle$ は方程式 (7.5) の構造からわかるように常に実数であるから，(7.9) によって全く偶然にではあるが $\langle p_x\rangle$ が実数であることがわかる．このことは ψ が波束を表わしているなら，(7.8) の第二の式から部分積分によっても示すことができる．

同じやり方で，粒子の "運動量" の成分の時間的変化の割合も計算できて，それは次のようになる．

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle=-i\hbar\frac{d}{dt}\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}d^3r$$

$$=-i\hbar\left(\int\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial t}d^3r+\int\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x}d^3r\right)$$

$$=-\int\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi\right)d^3r+\int\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*+V\psi^*\right)\frac{\partial\psi}{\partial x}d^3r$$

$$=-\int\psi^*\left[\frac{\partial}{\partial x}(V\psi)-V\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]d^3r$$

$$=-\int\psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\psi d^3r=\left\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle \tag{7.10}$$

ここでもやはり波動方程式を使って変形し，その後で部分積分を二回使ってある．

(7.9) と (7.10) の式に残りのベクトル成分を一緒にしたものが**エーレンフェストの定理** *Ehrenfest's theorem* を構成している．これらは古典論の運動方程式

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt}=\frac{\mathbf{p}}{m},\qquad\frac{d\mathbf{p}}{dt}=-\nabla V$$

に対応している．エーレンフェストの定理は対応原理の一例を与えている．つまり期待値が古典的変数をうまく表わしているような場合は，常に波束は古典論的粒子のように運動することを示しているわけである．これは通常，巨視的極限といわれるものであるが，この極限では波束の有限の大きさとか，内部構造を無視することができるのである．

8□エネルギーの固有関数

Schrödinger の波動方程式 (6.16) は，ポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{r})$ が時間に無関

係の場合にはかなり簡単化できる．つまり，この場合にはその一般解を $\mathbf{r}$ だけの関数と t だけの関数との積の和として表わすことができるのである．

8-1 波動方程式の分離

方程式（6.16）の一つの特解として $\psi(\mathbf{r},t)=u(\mathbf{r})f(t)$ という積の形に書かれるものを考えてみよう；そうすれば一般解はこの分離された形の解の和として書くことができるのである．この積の形の解を（6.16）に代入し，かつそれで両辺を割ると

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt}=\frac{1}{u}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u+V(\mathbf{r})u\right) \tag{8.1}$$

となる．（8.1）の左辺は t だけに，右辺は $\mathbf{r}$ だけに関係しているから両辺とも同じ一つの分離定数に等しくなければならない．これを E とすると，f に対する方程式はすぐに積分できて

$$f(t)=Ce^{-iEt/\hbar}$$

となる．ただし C は任意定数である．また u に対する方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]u(\mathbf{r})=Eu(\mathbf{r}) \tag{8.2}$$

となる．（8.2）は u について斉次であるから，定数 C は u を規格化するように選んであるものとしてよい．したがって，波動方程式の特解は

$$\psi(\mathbf{r},t)=u(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} \tag{8.3}$$

となる．

8-2 分離定数 E の意味

全エネルギーを表わすものとして方程式（6.13）で与えられている時間微分の演算子を，（8.3）の ψ に作用させてみると

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=E\psi \tag{8.4}$$

となることがわかる．方程式（8.4）の型の方程式は**固有値方程式** ***eigenvalue equation*** とよばれ，ψ は左辺の演算子の**固有関数** ***eigenfunction***，右辺で ψ にかかっている定数 E はそれに対応する**固有値** ***eigenvalue*** とよばれる．[1]（8.3）の ψ のようなエネルギー固

有関数は $|\psi|^2$ が時間が経っても変化しないところから，粒子の**定常状態** *stationary state* を表わすといわれている．

方程式（8.2）もまた一つの固有値方程式で，u（したがって ψ）が演算子 $[-(\hbar^2/2m)\nabla^2+V(\mathbf{r})]$ の固有関数であり，上と同じ固有値 E をもつということを表わしている．ψ が時間微分の演算子の固有関数ならば，同時に演算子 $[-(\hbar^2/2m)\nabla^2+V(\mathbf{r})]$ の固有関数であることが当然予想される．というのは（6.16）の波動方程式は，方程式（8.3）の形の分離した解に対してだけでなく，もっと一般的な解に対してもこの二つの演算子が同等であることを示しているからである．

ここでちょっと第III章にでてくる固有関数，固有値の物理的意味に関する議論を先回りして予想して，エネルギー固有値 E だけが粒子の全エネルギーを正確に測定したときに得られる結果だということを仮定することにする．そうすると，あらゆる実数値 E に対して方程式（8.2）の物理的に意味のある解 $u(\mathbf{r})$ が存在するかどうかということが興味ある問題になってくる．"物理的に意味がある"という指定された条件が $u(\mathbf{r})$ に課せられる境界条件の形で表わされない限り，この問題には直ぐ答えることはできない．この指定条件の問題とか，いろいろの型のポテンシャルエネルギーの関数 $V(\mathbf{r})$ に付随しておこってくるエネルギー固有値の一般的性格とかいう問題を，これからこの節で考えてゆくことにする．

8-3　遠方における境界条件

ところでこれまでに出てきたところでは，波動関数には二つの種類のものがあった：その一つは波束で，それは十分一カ所に局所化されていて，その規格化積分 $\int|\psi|^2 d\tau$ が収斂するものである．今一つは（6.10）の関数のような伝播する調和振動波で，それは遠方でも大きさは変わらず，無限に大きな体積についてとった規格化積分は発散する．第一の種類のものはその位置が最初からはっきりと局所化されている自由粒子か，あるいはポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{r})$ から導かれる外力によって空間のある特定の領域に束縛されている粒子を表わすものと解釈することができる．第二の種類のものは，局所化または束縛された粒子ではなくて，空間の遠方からまた他の遠方へと，考えている

1）固有関数，固有値の英語としては eigenfunction, eigenvalue の代わりに characteristic function, characteristic value という言葉を使うこともしばしばある．

領域を通過して走ってゆく粒子を表わしているのである．このような波動関数は力の場で粒子が散乱されるのを記述するときに役に立つ.[1] しかし，ともかく，どちらの場合にせよ波動関数は遠方ではすべての方向について有界にはなっている．

8-4 連続条件

時間に無関係な波動方程式 (8.2) は $\mathbf{r}$ に関する二階の線型微分方程式である．したがって $V(\mathbf{r})$ が有限である限り，それが連続であろうとなかろうと，ある曲面上での波動関数とその勾配とがわかっていれば，微分方程式を積分して任意の点の波動関数を得ることが可能になるわけである．したがって，ある物理的な状態を波動関数で一意的に表わすことができるために，波動関数とその勾配が空間のあらゆる点で連続で，有限で，一価であることを要求するのが合理的である．その上，このような要求をおくと，その結果として§7 で定義した位置の確率密度 $P(\mathbf{r})$ と確率の流れの密度 $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ とがいたるところで有限かつ連続であるということになるわけである．

8-5 無限大のポテンシャルエネルギーに対する境界条件

もし $V(\mathbf{r})$ がどこかで無限大ならば，有限な $V(\mathbf{r})$ と上の連続条件とから出発して，その極限をとるという手つづきによって適当な境界条件をたてることができる．

たとえば，ある連続な曲面を境いとして $V(\mathbf{r})$ に無限大の不連続なとびがある場合を考えよう．この場合問題は，ポテンシャルエネルギーは曲面の片側では有限，他の側では $+\infty$ になっていて，この曲面上での $u(\mathbf{r})$ と ∇u とに対する境界条件をきめたいわけである．連続な曲面の代わりに，考えている点でその曲面に切する平面を考え，また曲面の片側で連続的に変化しているポテンシャルのエネルギーの代わりに，定数で変化しないポテンシャルエネルギーを考えておいても問題の本質的な点には変わりはない．しかも V が常数だけ変化するということは，E がその同じ定数だけ変わるのに等しいから，曲面の片側で $V=0$ としても一般性を失わないことになる．今，曲面上の考えている点を座標の原点に，その切平面に垂直に x 軸を選んでおくとする．

---

1) もう一つの可能な種類として，遠方で無限大になるような種類の波動関数がある；しかし，この種のものは物理的に意味のないものである．というのは空間の遠方の領域で位置の確率密度が無限大に大きくなってしまうような粒子を問題にしなければならないような理由は今のところないからである．

すると波動方程式 (8.2) は三つの空間座標に分離される．そして u の y, z に対する関係は $x=0$ の平面での V の不連続性によって変化をうけない．したがって次の一次元の波動方程式を解くことを考えればよい．

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}+V(x)u=Eu \tag{8.5}$$

ただし $x<0$ では $V(x)=0$, $x>0$ では $V(x)=V_0$ としておき，最後には $V_0\to+\infty$ の極限にうつることにする．$0\leq E<V_0$ と仮定すれば方程式 (8.5) の一般解は

$$u(x)=A\sin\alpha x+B\cos\alpha x,\qquad x<0,\qquad \alpha=+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$u(x)=Ce^{-\beta x}, +De^{\beta x}\qquad x>0,\qquad \beta=+\left[\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

となる．遠方で u が有界であるはずという境界条件から $D=0$ ととることが必要になる．そうすると $x=0$ での u の連続性から，$B=C$．一方 du/dx の連続性から $\alpha A=-\beta C$ という関係が得られる．V_0 が無限大になれば β も無限大になり，かつ $x<0$ の解は有限でなければならない．このことをつかえば，連続性の条件から得られた第二の関係式は $V_0\to\infty$ のとき C は零になり，したがって B もまた零になることを示すことになる．この関係からだけでは A をきめることはできないが，これは規格化によってきめられるはずである．

こうして，ポテンシャルに無限大のとびのある面での境界条件は，波動関数は零になりその勾配の面に垂直な成分は不定だということになる．$E<V_0$ という上の仮定も，最後には $V_0\to\infty$ とするのだからこの結論に何等の制限を加えるものにはなっていない．$E<0$ のときには $x<0$ に対する解の sine と cosine を hyperbolic sine と hyperbolic cosine でおきかえれば（解は $x=0$ の近くでだけなりたてばよいのだから，このおきかえは許される)，最後の結果には変わりはない．負の側から $x\to0$ とするとき，P, S_x は共に零となるから，$x=0$ で du/dx がたとえ連続でなくても，P と S_x とは連続であることは注意すべきことである．

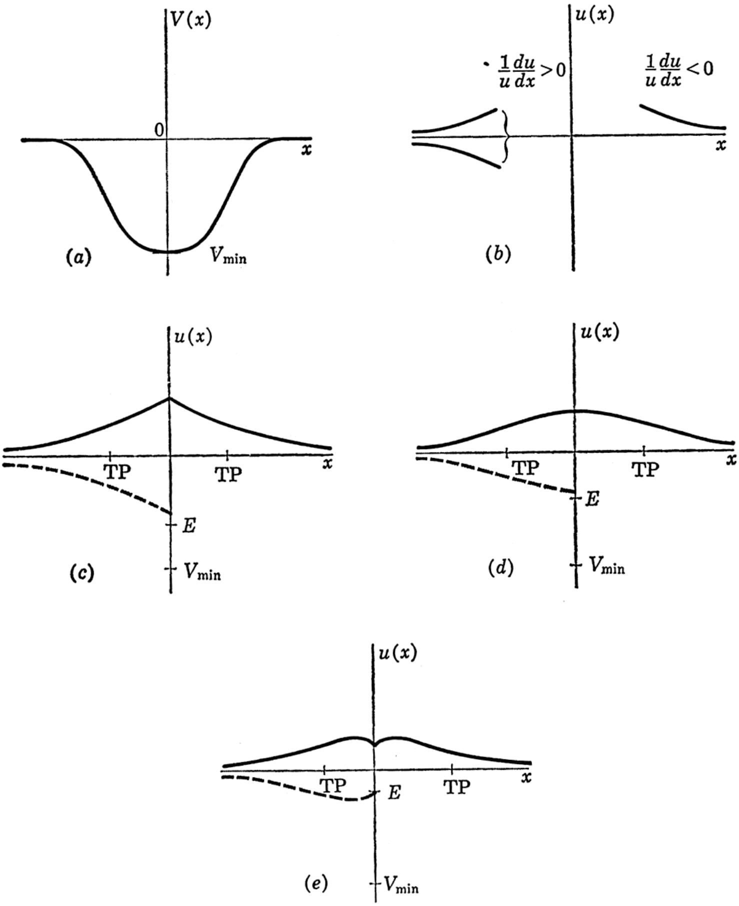
こういう型の境界面は，完全剛体で物を通さない壁を表わしている．というのは，これに類似の古典的な場合では，有限なエネルギーの粒子はこういう面に接触すれば瞬間的にその運動量の x 成分の向きを逆にされてしまうことに相当しているからである．

8-6 一次元でのエネルギー固有値

ポテンシャルエネルギーによって空間のある特定の領域に束縛されている粒子を表わす（第一の種類の）エネルギー固有関数は常に離散的な固有値をもつのがその特徴であるが，遠方でも零にならない（第二の種類の）固有関数はある連続的な領域にわたる固有値をもっている．このことは一次元の波動方程式（8.5）の解の性質を調べることによって，定性的にわかることなのである．

まず，十分大きな正および負の x の値に対して $V(x)$ がある定数（零としておいてよい）に等しくなっていて，かつ $E<0$ の場合を考えよう．この全エネルギー E の古典的粒子は無限に遠くまで脱け出してゆくことはできない．実際には，このような古典的粒子は，Eが $V(x)$ の最小値 $V_{\min}$ に等しいか，またはそれより大きい領域でだけ存在することができる．$|x|$ が十分大きくて $V=0$ が成り立つところで許される波動関数の形は，明らかに $e^{-\beta|x|}$，$\beta=+(-2mE/\hbar^2)^{1/2}$ である．絶対値の大きな正負の x に対するこの二つの解は，波動方程式と連続条件とを使えばその中間の点，たとえば $x=0$ にまで延長してくることができる．正負の x に対する二つの解の各々にかけておくことができる任意定数を適当に選んでおけば，この点において u を連続にすることは常に可能である．そうしたとき，この二つの解が E の任意の値に対して，du/dx まで同じ値をもって $x=0$ でつながることにはならないだろうということは少し考えてみればわかることなのである．しかし $x=0$ で u も，du/dx もともに連続になる E の特別の値が存在するかもしれない．この条件は次のような考え方をすれば見つけることができる．

$E<V(x)$ の領域では $(d^2u/dx^2)/u$ は正であり，したがって u は x 軸の方へ向って凸になっている．つまり $\pm\infty$ から延長してきた二つの解の値と勾配との比，つまり $(du/dx)/u$ はEがVより小さい領域に u がある限り常に反対の符号をもっている．5図 a に示されているポテンシャルに対して5図 b がこのことを表わしている．この図では $x<0$ については u の符号が正負両方のものを選んである．$E=V(x)$ となる点は古典論的運動での**回帰点** *turning point*（図では TP であらわしてある）とよばれている．この点はエネルギーEをもつ古典的粒子の運動の限界で，粒子はここで方向をかえて廻ってゆくか，もとの運動を逆にたどってゆくかするからである．これらの点では $d^2u/dx^2=0$ で u の曲率は零になる．



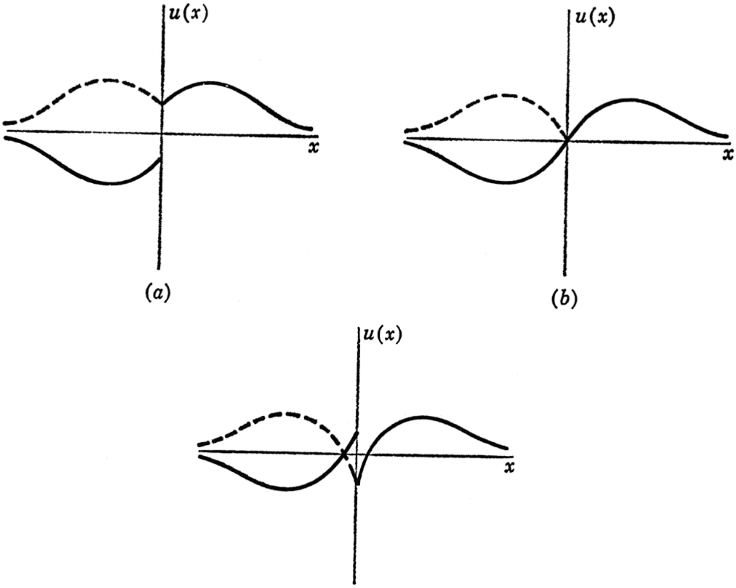
第5図 (*a*) ポテンシャルエネルギーの関数，(*b*) $|x|$ が大きいところでの解；(*c*) と (*e*) とは E の値が (*d*) に示されているエネルギー固有値よりもそれぞれ小さい（より深い）か，大きいため，波動関数かまたはその勾配数が $x=0$ で不連続になっている．

二つの解を滑らかにつなぎ合わせるのに必要なのは，明らかに $E>V(x)$ の領域である．というのはその場合には $(d^2u/dx^2)/u$ が負になり，したがって u が x 軸に向って凹になるはずである；このことが〔u の〕勾配と値の比を等しくすることを可能にするわけである．5図 c では遠方からつなげるまで延長されてきた二つの解は，E がまだいくらか小さい目であるために，$x=0$ での u の値は等しくすることができても勾配は等しくならなかったり（実線），勾配は等しいが値が等しくなかったり（左の点線と右の実線）している．5図 d は E が c のときよりいくらか大きいとき（E は負だから絶対値は小さくなる），5図 e は E がさらに大きいときである．5図 c, d, e では E と $V_{\min}$ の値を u 軸上に，回帰点を x 軸上に示してある．

8-7 離散的なエネルギー準位

今までみてきたように，ポテンシャルエネルギー $V(x)$ によって束縛された粒子を表わし，境界条件と連続条件を満たす固有関数は図 5d で示されているような E の特別の値に対してだけ存在する．古典論での場合から類推すれば，このような固有関数が存在するための必要条件は $V_{\min.}<0$ であることである．そしてそのとき，E は $V_{\min.}$ と 0 との間にあることになる；古典論の場合と同様に，この条件は一次元の場合には同時に十分条件にもなっているが，三次元の場合にはそうとはいえない（第Ⅳ章の問題10および§9，§15を参照）．

もし図5a にかかれているような**ポテンシャルエネルギーの穴** *potential energy well* が十分幅が広いかまたは深いかすれば，やはり負ではあるがより大きなエネルギー固有値に対する固有関数があることになるだろう．第6図の a, b, c には第5図の c, d, e と同じように順々に増えてゆく（順々に絶対値が減少してゆく負の）E の値に対応する一連の波動関数を示してある；ここでも $x<0$ では u の正，負の二つの値がとってある．第5図の d と第6図の b とが示しているのが井戸型ポテシャルの穴 $V(x)$ に束縛された粒子の一番小さい方の二つのエネルギー固有値，すなわち**エネルギー準位** *energy level* に対する固有関数に他ならない．以上の定性的な議論を拡張して，もっと高い離散的エネルギー準位があるとき，それらの固有関数は，そのすぐ下のエネルギー固有値に対応する固有関数よりも節（node）が一つだけ多くなっていることは容易にわかるだろう．



第6図　ポテンシャルの幅がかなり広いかまたは深くなったときの図5の E より大きな値の（従ってより浅い）E に対する解．(a), (b), (c) の順に E は大きくなっていて，(b) では固有値になっている．つまり波動関数と勾配とが共に $x=0$ で連続になっている．

こうして $x\to\pm\infty$ で有限の値に近づいていくポテンシャルエネルギーに対しては，$V(x)$ の形と粒子の質量に応じて，有限個の，またはある場合（$|x|$ が大きいところでの $V(x)$ の一定値への近づき方が十分ゆっくりしている場合）には無限個の離散的なエネルギー準位が存在しうることになる．また $x\to\pm\infty$ のとき $V(x)\to+\infty$ となるときは，上と同様の議論から常に無限に多くの離散的なエネルギー準位があることがわかる．そして任意にかけておくことができる定数を除けば，これらのエネルギー準位の一つ一つに対応して丁度一つの固有関数 $u(x)$ が存在することになる．

8-8　連続的なエネルギー固有値

エネルギーの固有値が，$V(+\infty)$ と $V(-\infty)$ の二つの数のうちの小さい方よりも大きいとき，そういう固有値のすべてに対して境界条件と連続条件とを満たす固有関数をみつけることができる．たとえば，ポテンシャルエネルギーが図5aで示されている形をしていれば，Eのすべての正の値に対して波動方程式の解が存在する．というのは $|x|$ の大きいところでの解は

$$A\sin\alpha|x|+B\cos\alpha|x|,\qquad \alpha=+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{8.6}$$

という形をしており，この二つの項のいずれについてもそれを残しておいてはならないとする理由はないからである．そこで，この解を $x=0$ のところまで延長してきたとき，$|x|$ の大きいところでの波動関数の位相を調整して（つまり原点から遠いところでの解の比 A/B を調節して），$x=0$ でなめらかにつなぐことができるようにすることは常に可能である．

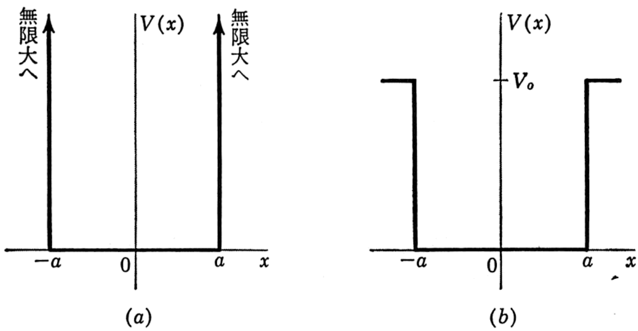
場合によっては，**周期的** *periodic*（あるいは**多重周期的** *multiply periodic*）と**非周期的** *aperiodic* という古典論でのいい表わし方を，離散的エネルギー固有値および連続的エネルギー固有値に付随したそれぞれの粒子の運動を指示するのに用いることがある．

8-9　三次元での離散的固有値と連続的固有値

これ以上立ち入った議論をすることなしに，以上の結果は三次元波動方程式（8.2）に対しても無理なくひきうつせるものと仮定しておこう．そうだとすれば，すべての方向に対して $r\to\infty$ のとき $V(\mathbf{r})\to+\infty$ の場合，$+\infty$ にまで達する無限に多くの離散的エネルギー単位があるものと予想される．もしも，ある方向で $r\to\infty$ にしたときに $V(\mathbf{r})$ が有界になっておれば，V の形に応じて有限個または無限個の離散的準位がありうるわけである．この場合には離散的エネルギー準位は，どの方向かで $V(\infty)$ がとる最小の値を越えることはできない．この最小の $V(\infty)$ を超えるEの値に対しては，エネルギー固有値は $+\infty$ に達する連続的な区間をおゝうことになる．

9□一次元の井戸型ポテンシャル

量子力学を使って粒子の離散的エネルギー準位を計算する簡単ではあるが一つの具体的な例として，ポテンシャルエネルギーが一定になっている領域を区切る境界面が反射壁になっていて，それによって粒子がある領域の中に束縛されているときの運動を考えよう．ポテンシャルエネルギーについては次の二つの簡単な型のものを考えることにす



第7図　一次元の井戸型のポテンシャル　(a) は完全剛体の壁，(b) は有限のポテンシャル

る．一つは図7aに示されているように，$-a<x<a$ のところでは $V(x)=0$, $|x|>a$ では $V(x)=+\infty$ の場合で，これは完全剛体の物を通さない壁が $x=\pm a$ にある場合に相当する．図7b に示してあるのは壁のところでポテンシャルのエネルギーの値が急にとぶが，そのとびの大きさが有限な場合，すなわち $|x|>a$ で $V(x)=V_0$ となる場合である；その形から，この後の方のポテンシャルは**四角い井戸型のポテンシャル** ***square well potential*** とよばれている．古典的には粒子は全エネルギー E が V_0 よりも小さい限り二つのポテンシャルのどちらででも同じ運動をする；しかし，量子力学的には，後でわかるようにその振舞いが違ってくる．一般に，ある領域の境界で有限の急激な増加があるポテンシャルエネルギーは，粒子をその領域の内側に押しこめようとするものである．このようなポテンシャルは，作用力 $-dV/dx$ が常に $x=0$ の点への方向をもっている図5a の型のポテンシャルの一つの極限の場合と考えておいてよい．つまり四角い井戸型ポテンシャルに伴う作用力は，境界面以外では零であるから，粒子は $x=\pm a$

の点をよぎるときに原点に向っての瞬間的な衝撃をうける以外は自由に振舞うわけである．

9-1 完全剛体の壁

§8で示したように，ポテンシャルエネルギーが図7aのような形をしていれば，$x=\pm a$ の点で波動関数は零になっていなければならない．$|x|<a$ に対する波動方程式の形は簡単で，(8.5) から

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}=Eu \tag{9.1}$$

となり，これは

$$u(x)=A\sin\alpha x+B\cos\alpha x, \qquad \alpha=+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{9.2}$$

という一般解をもっている．$x=\pm a$ での境界条件を適用すると，

$$A\sin\alpha a+B\cos\alpha a=0, \qquad -A\sin\alpha a+B\cos\alpha a=0$$

これから

$$A\sin\alpha a=0, \qquad B\cos\alpha a=0$$

が得られる．

ところで，AとBとがともに零になっては都合がわるい．というのはその場合には，いたるところで $u=0$ という物理的に意味のない解になるからである．またある E，すなわちある α の与えられた値に対して，$\sin\alpha a$，$\cos\alpha a$ をともに零にすることもできない．だから，次の二組の解が可能になる：第一の組に対しては

$$A=0 \quad \text{でかつ，} \cos\alpha a=0$$

で，第二の組に対しては

$$B=0 \quad \text{でかつ，} \sin\alpha a=0$$

結局 $\alpha a=n\pi/2$．ただしnは第一の組では奇数，第二の組では偶数である．そうするとこの二組の解とそのエネルギー固有値は

$$u(x)=B\cos\frac{n\pi x}{2a}, \qquad n：\text{奇数}$$

$$u(x)=A\sin\frac{n\pi x}{2a}, \qquad n：\text{偶数}$$

かつ両方の場合を通じて

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{8ma^2}$$

となる．$n=0$ というのは物理的に意味のない解 $u=0$ という結果を与えるに過ぎないし，また n が負の解は n が正の解と一次的に独立ではないということも明らかである．それぞれの場合で固有関数を規格化するように定数 A および B を選ぶことはむつかしいことではない．

こうして，あらゆる正の整数をとる量子数 n に対応して離散的エネルギー準位の無限の系列が存在することになる．それぞれの準位に対しては丁度一つずつの固有関数が存在し，n 番目の固有関数がポテンシャルの井戸の内につくる節の数は $n-1$ に等しい．この結果は§8 の議論と一致している．面白いことは，最低エネルギー準位すなわち基底状態のエネルギー準位の大きさの程度が，不確定性関係（3.1）と一致することが示されることである．つまり位置の不確定の程度が a ならば，運動量の不確定さは少なくとも $\hbar/a$ の程度になり，それから今度は最低の運動エネルギーが $\hbar^2/ma^2$ 程度であるということになるからである．

9-2　有限な階段ポテンシャル

ポテンシャルエネルギーが図 7*b* のような形をしているときも，$|x|<a$ では方程式（9.1）がそのまま成り立つから，必要なのはその一般解（9.2）に $|x|>a$ に対する解を付け加えることである．この領域での波動方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}+V_0u=Eu$$

で，$E<V_0$（束縛状態）に対する一般解は

$$u(x)=Ce^{-\beta x}+De^{\beta x},\qquad \beta=+\left[\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{9.3}$$

となる．§8 で調べた $x=\pm\infty$ での境界条件から，方程式（9.3）が $x>a$ での解を表わしているなら $D=0$，$x<-a$ での解を表わしているなら $C=0$ となる．

そこで（9.2）と（9.3）とに $x=\pm a$ で u と du/dx とが連続であるという条件を課することにすると

$$A\sin\alpha a+B\cos\alpha a=Ce^{-\beta a},\qquad \alpha A\cos\alpha a-\alpha B\sin\alpha a=-\beta Ce^{-\beta a}$$

$$-A\sin\alpha a+B\cos\alpha a=De^{-\beta a},\qquad \alpha A\cos\alpha a+\alpha B\sin\alpha a=\beta De^{-\beta a}$$

となり，これから

$$2A\sin\alpha a=(C-D)e^{-\beta a},\qquad 2\alpha A\cos\alpha a=-\beta(C-D)e^{-\beta a}\tag{9.4}$$

$$2B\cos\alpha a=(C+D)e^{-\beta a},\qquad 2\alpha B\sin\alpha a=\beta(C+D)e^{-\beta a}\tag{9.5}$$

となる．$A=0$，かつ $C=D$ でなければ，(9.4) の結果として

$$\alpha\cot\alpha a=-\beta\tag{9.6}$$

が得られ，同様に $B=0$ かつ $C=-D$ でなければ，方程式 (9.5) によって

$$\alpha\tan\alpha a=\beta\tag{9.7}$$

となる．

ところで，方程式 (9.6) と (9.7) とが同時に成立することは不可能である．というのは β を消去してみると $\tan^2\alpha a=-1$ ということになり，これでは α が虚数 β が負になることになって方程式 (9.3) と矛盾してくるからである．一方，A, B, C, D が共に零になっては意味がないわけである．したがって，この場合も解は二つの種類に分けられることになる：第一の組に対しては

$$A=0,\quad C=D\quad \text{でかつ}\quad \alpha\tan\alpha a=\beta$$

第二の種類に対しては

$$B=0,\quad C=-D\quad \text{でかつ}\quad \alpha\cot\alpha a=-\beta$$

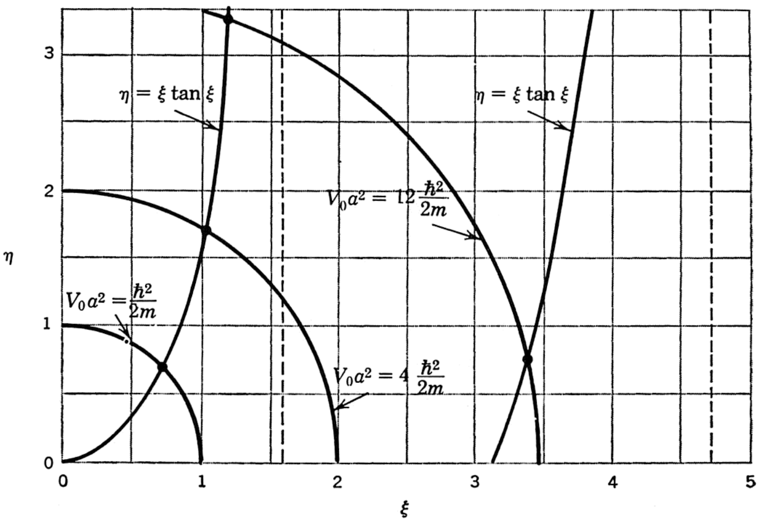
となる．

9-3 エネルギー準位

α, β の定義 (9.2) および (9.3) を使って，方程式 (9.6) および (9.7) を数値計算またはグラフによる方法によってとけばエネルギー準位が求められる．ここでは，実際に解を出してくるために簡単なグラフによる方法を述べておく．この方法は離散的な準位がいくつあるかということが，V_0 と a とにどんな風に関係しているかを極めてはっきりと示してくれるからである．$\xi=\alpha a$, $\eta=\beta a$ とおくと，(9.7) は $\xi\tan\xi=\eta$ となる．ただし

$$\xi^2+\eta^2=\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

である．ξ, η は正の値に限られるから，この場合のエネルギー準位は第一象限で，ξ を変化させたときの $\eta=\xi\tan\xi$ の曲線と，既知の半径 $(2mV_0a^2/\hbar^2)^{1/2}$ をもつ円との交

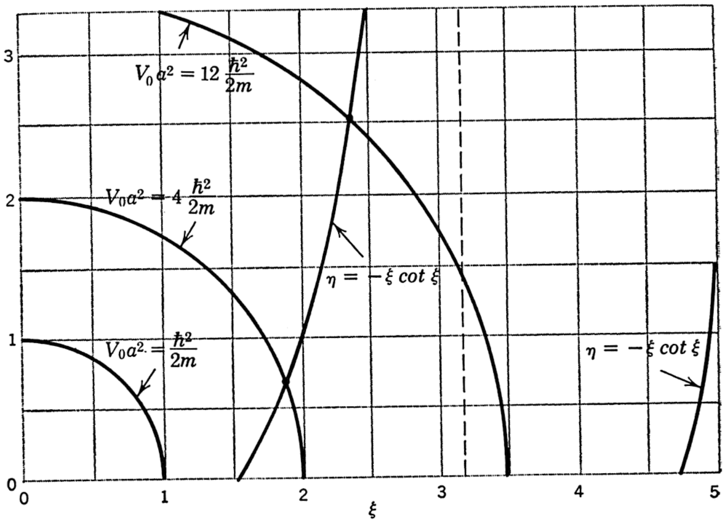


第8図 V_0a^2 の三つの値に対する方程式 (9.7) のグラフによる解．縦の点線は $\eta=\xi\tan\xi$ の漸近線の中の最初の二本を示す．

点として求められる．V_0a^2 の値が異なる三つの場合についての作図を図8に示してある；エネルギー準位の値の中，小さい方の二つでは方程式 (9.7) はそれぞれ一つの解をもち，一番大きいものには二つの解があることになる．

第9図は方程式 (9.6) の解についての同様な作図を示したもので，エネルギー準位は同じ円と $\eta=-\xi\cot\xi$ の曲線との第一象限での交点から求められる．V_0a^2 の一番小さい値には解がなく，大きい方の二つには一つずつの解がある．〔先の結果と一緒にすれば〕V_0a^2 は増えるにつれて一つ，二つ，三つの解があることになる．

第8図および第9図から明らかなように，粒子の質量が与えられたとき，エネルギー準位は V_0a^2 という形で位置のエネルギーに関係している．V_0a^2 が零と $\pi^2\hbar^2/8m$ との間にあるときには第一の種類の一つのエネルギー準位があり，$\pi^2\hbar^2/8m$ とその4倍の大きさの間ではそれぞれの種類のエネルギー準位が一つずつ，全部で二つのエネルギー準位がある．V_0a^2 が増えるにつれてエネルギー準位はまず第一の種類の，次に第二の種類の準位というふうに次々に現われてくる．エネルギー順位を低いものから順に並



第9図　V_0a^2 の三つの値に対する方程式（9.6）のグラフによる解．縦の点線は曲線 $\eta=-\xi\cot\xi$ の最初の漸近線を示す．

べたとき，n 番目の固有関数は $n-1$ 個の節を有つということを（9.2）から導くことは難しくない．

9-4　パリティ

以上の議論からわかることは，x の符号をかえたとき，第一の組の固有関数は符号の変わらない偶関数であり（$u(x)=u(-x)$），第二の組の固有関数は符号の変わる奇関数（つまり $u(x)=-u(-x)$）になっている．このように固有関数が偶，奇の型に分けられることは偶然のことではなく，ポテンシャルエネルギーの関数 $V(x)$ が $x=0$ に関して対称であるという事実から直接でてくる結果であることを次に示そう．（8.5）の波動方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2}+V(x)u(x)=Eu(x) \tag{9.8}$$

で，x の符号を変えたとき，$V(-x)=V(x)$ ならば

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(-x)}{dx^2}+V(x)u(-x)=Eu(-x)$$

となる．

これで見ると，$u(x)$ も $u(-x)$ も同じ波動方程式の同じ固有値Eに属する解になっており，このエネルギー準位に対応する二つまたはそれ以上の一次独立な固有関数がない場合には，この二つの解はただそれにかかる定数で違いうるだけで，

$$u(-x)=\varepsilon u(x) \tag{9.9}$$

となる．(9.9) の x の符号をかえれば，$u(x)=\varepsilon u(-x)$．この二つの方程式から直ちに

$$\varepsilon^2=1,\ \text{すなわち}\ \varepsilon=\pm 1$$

となる．つまり，このような対称なポテンシャルの固有関数は皆 x の符号の交換に対し偶性であるか，奇性であるかであることになる． このような波動関数は **パリティ** （または**偶奇性**） *parity* が偶または奇であるといわれる．

もしも一つの固有値に二つ以上の一次独立な固有関数があるならば，これらの固有関数は必ずしも一定の偶奇性をもっていなくともよい．すなわち偶関数または奇関数でなくともよいのである．しかしすぐにわかることは，こういう固有関数で作った一次結合に偶奇性をもたすようにすることができるということである．たとえば，固有関数 $u(x)$ が一定の偶奇性をもっていないとしよう．それは偶関数である $u_e(x)=1/2[u(x)+u(-x)]$ と奇関数である $u_o=1/2[u(x)-u(-x)]$ とを使って，常に

$$u(x)=u_e(x)+u_o(x)$$

と書ける． 波動方程式 (9.8) が対称であるなら， それを次のように書き直すことができる．

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_e}{dx^2}+(V-E)u_e-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_o}{dx^2}+(V-E)u_0=0 \tag{9.10}$$

(9.10) の方程式で x の符号をかえると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_e}{dx^2}+(V-E)u_e+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_o}{dx^2}-(V-E)u_0=0 \tag{9.11}$$

となる．方程式 (9.10) および (9.11) を互いに加えたり，引いたりすれば，u_e と u_o は同じ固有値Eに関する波動方程式の解になっていることが分かる．

9-5　簡単化された解き方

解が定まったパリティをもっていることがわかっていれば，エネルギー準位の決定が簡

単化されることがよくある．つまりその場合は，xが正のときの解さえ見つければよいからである．$x=0$ で解が偶関数ならば勾配は零，奇関数ならば関数値が零である．たとえば，もし偶関数の解を見つけようと思えば，方程式（9.2）および（9.3）とは直ちに

$$u(x)=B\cos\alpha x \qquad 0<x<a$$

$$u(x)=Ce^{-\beta x} \qquad x>a$$

とおきかえることができる．$x=a$ で u と du/dx とをともに連続とする代わりに，$(1/u)\times(du/dx)$ という比を $x=a$ で連続にすれば十分である．というのは，その場合規格化の定数 B, C は消去されるから，これから直ちに（9.7）が得られる．同様に奇関数の解は

$$u(x)=A\sin\alpha x \qquad 0<x<a$$

$$u(x)=Ce^{-\beta x} \qquad x>a$$

となり，$x=a$ で $(1/u)(du/dx)$ が連続ということから直ちに（9.6）が得られる．

問　題

1．§6の議論を使って自由粒子の場合で，ψ の微分方程式の内，時間に関する二階の微係数を含んでいるものをつくれ．この方程式の解のうち自由粒子に対する Schrödinger 方程式の解と共通になっていないものについて論ぜよ．

2．自由粒子に対する一次元の Schrödinger 波動方程式（6.8）はガリレイ変換に対して不変であることを示せ．ただし，それには $x'=x-vt$, $t'=t$ なる変換を適用して，その際，変換された波動関数 $\psi'(x',t')=f(x,t)\psi(x,t)$ は，f が $x,t,\hbar,m$ および v のみを含む場合に変換された変数についての方程式（6.8）をみたすことを示せばよい．また，f の形を求め，かつ伝播波の解 $\psi(x,t)=A\exp i(kx-\omega t)$ が期待される通りの変換をうけることを示せ．

3．ψ が波束である場合，方程式（7.4）の体積積分 P および表面積分 S_n が収斂するためには，ψは r の大きなところでどのように小さくなる必要があるか．

4．波束について，$\langle p_x\rangle$ が実数であることを直接示せ．

5．三次元の波束について

$$\frac{d}{dt}\langle x^2\rangle=\frac{1}{m}(\langle xp_x\rangle+\langle p_xx\rangle).$$

であることを示せ．

6．ポテンシャルが第7図 b の形をしているとき，$V_0a^2=6\hbar^2/m$ としてエネルギー準位を計算し，そのときの三つの束縛状態の固有関数の形を描け．そして，これを第7図 a のポテンシャルの最初の三つの状態と比較せよ．

7．第7図 b のポテンシャルのエネルギー準位とポテンシャル；$V(x)=+\infty$, $x<0$；$V(x)=0$, $0<x<a$；$V(x)=V_0$, $x>a$ に対するエネルギー準位との間の関係を論ぜよ．

8．いたるところでポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{r})$ を定数だけ変化させても，時間を含まない波動関数は変わらないことを示せ．また，そのとき，エネルギーの固有関数はどうなるか？

第Ⅲ章　固有関数と固有値

第Ⅱ章では，Schrödinger の波動方程式を作り上げて，それを簡単な問題に応用した．§7 では波動関数の物理的解釈についての 2，3 の議論をした．この種の議論の大部分は，いろいろの物理量を表わす演算子の平均値，いいかえれば期待値の計算を典拠にするものであった．さらにそこへ，位置の確率関数を導入した．こうして今では，一個の粒子の空間的な分布に関係して現われる性質はどんなものでも（たとえば粒子の平均位置からのずれの二乗平均），波動関数から計算することができるわけである．だが位置以外の演算子については，ただその平均値だけが計算できるに過ぎない．波動関数の解釈を完結させるのに必要なのは，明らかに一般の演算子の確率関数を計算する方法である．これがわかれば一々別々に仮定を設けないでも，§7 で使ったような期待値の表式を求めることができる．

この章では，まず波動関数の完全な解釈を導くことができるための三つの物理的な要請を置き，次にそれを応用して粒子の全エネルギーと運動量とを調べ，また典型的な例題を解いていくことにする．§7 に出てきた解釈は，実はこの一般的な取り扱いの特別な場合に過ぎないことが，ここではっきりするようになる．

10⊡波動関数解釈に関する要請とエネルギー固有関数

波動方程式（6.16）の一つの解であり，ポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{r})$ を持つ質量 m の粒子の運動を記述する波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ を出発点にして，この波動関数で粒子の運動の諸性質を，§3 の不確定性の関係に矛盾しない範囲で，できるだけ完全に記述することを考えよう．

10-1　演算子としての力学変数

第一の要請は，粒子の運動に関係する力学変数は，それぞれに一つの線型演算子として

表わすことができる,[1] ということである．この演算子は位置に対する $\mathbf{r}$ のように，単に数をかける演算子のこともあれば，運動量に対する $-i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ のような，ある微分演算子のこともある．

各々の演算子には，§8の初めの方で定義したような，一つの固有値方程式を付随さすことができる．つまり演算子 Ω には，Ω の固有値 ω_μ に対応する固有関数 v_μ があって，それらの間に

$$\Omega v_\mu = \omega_\mu v_\mu \tag{10.1}$$

という方程式が成り立っている．

第二の要請としては，Ω で表わされる力学変数について，何らかの正確な測定を行なった場合の可能な結果は Ω の固有値 ω_μ のうちのどれか一つであって，それ以外の値は得られないとする．これは，物理的な意味を持つ変数を表わすあらゆる演算子の固有値は実数である，ということを前提としている．

10-2　固有関数による展開

次に，いかなる力学変数の固有関数もすべて**関数の完全系** *a complete set of function* を作る．すなわち任意の連続関数は，これらの固有関数を使って展開することができる，と仮定する．これは物理的な仮定というより，むしろ数学的な仮定であって，この仮定については，後でエネルギーや運動量の固有関数と関連させて調べることにしよう．[2]

さて，ある波動関数 ψ を演算子 Ω の固有関数 v_μ を使って展開したとして，この ψ に§7の始めに述べた統計的解釈を適用してみる．この解釈によれば多数の，合同な，重なり合っていない空間領域あるいは時間間隔があって，その一つ一つに ψ で記述される粒子があると考えられる．そこで，これらの粒子のそれぞれについて，Ω で表わされる力学変数を測定するわけである．物理的な第三の要請として，固有値 ω_μ を結果にもつ測定の数は，ψ を展開したときの v_μ の係数の大きさの二乗に比例するとする．この要請は M. Born によるものであるが（28頁を見よ），これによってどの力学変数にもそれに付随した確率関数を考えることが可能になるわけである．[3] この要請の系 (corollary) としていえるのは，測定をすれば，特定の固有値 ω_μ という値が必

1) 演算子 Ω が線型であるというのは，それが，任意の複素数 a_i および関数 ψ_i に対して方程式 $\Omega(a_1\psi_1+a_2\psi_2)=a_1\Omega\psi_1+a_2\Omega\psi_2$ を満たす場合てある．

2) 完全性の議論については，たとえば次のものを見よ．R. Courant and D. Hilbert, "Methods of Mathematical Physics", Vol. I, p. 369 (Interscience, New York, 1953)

ず得られるのは，粒子を記述する波動関数がω_μに対応する固有関数 v_μ である場合に限られる，ということである．

任意の演算子 Ω についてこういう要請から出てくる結果を調べるよりも，むしろこの節では粒子の全エネルギー，§11 では運動量について考えることにしよう．この結果は大部分，直ちに他の物理量の演算子にあてはめることができる．

10-3 全エネルギーの演算子

不確定性の関係（3.3）によれば，有限時間内に粒子の全エネルギーを正確に測ることはできないわけである．だから全エネルギーが確定した値を持つものとされている場合には，位置エネルギー $V(\mathbf{r})$ は時間に無関係であるということが本質的になる．その場合，§8 で全エネルギーの演算子 $i\hbar\partial/\partial t$ と同等なことが示された演算子 $-(\hbar^2/2m)\nabla^2+V(\mathbf{r})$ のもつ固有関数 $u(\mathbf{r})$ は，時間を含む必要はない．エネルギーの固有値方程式は方程式（8.2）によって

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]u_E(\mathbf{r})=Eu_E(\mathbf{r}) \tag{10.2}$$

となる．ただし，この固有関数 $u_E(\mathbf{r})$ は固有値Eに対応するもので，§8 の境界条件と連続条件とに従う．

§8 で調べたように，エネルギーの固有関数は二つの種類〔class〕に分類することができる．一つは十分よく局所化されていて離散的固有値が付随しており，他は遠方でも有限で，ある範囲の連続的な固有値を持っている．

10-4 箱の中での規格化

この二種類の固有関数を同一の基礎の上で取り扱える方が望ましいことがしばしばある；これには，考えている粒子を任意に大きいが，しかし有限な箱の中に閉じこめることにすればよい．このようなゆき方が適用できる最も簡単な状況は物理的にいえば，箱の壁が完全剛体になっていて，§8 でわかったようにそこでは波動関数が零になって

---

3)（前頁）このような，力学変数によらない，“隠れた変数”を用いた別の決定論的な解釈が D. Bohm, *Phys. Rev.*, **85**, 166, 180 (1952) によって提出されている．ただし，この解釈は広くうけ入れられているわけではない．なお，次のものも見よ．J. S. Bell, *Rev. Mod. Phys.*, **38**, 447 (1966)；D. Bohm and J. Bub, *Rev. Mod. Phys.*, **38**, 453, 470 (1966)

いるような場合である．この場合には，§8の議論からわかるように，あらゆる固有値は離散的になる．この箱が，問題の中の物理的に意味ある領域の大きさに比べて大きいものであれば，もともと離散的だった固有値は箱を持ってきたところで実際には何の影響も受けない．というのは固有関数は壁がもち込まれる前からすでに，壁の辺では非常に小さかったからである．また箱の無いときに連続的に分布していた固有値は非常に接近して分布するようになる．このことは§11で，自由粒子について具体的に示すことにしよう．

しかし，箱の壁のところで波動関数が零になるとするより**周期的な境界条件** ***periodic boundary condition*** に従うと仮定する方がより都合がよい．そうすれば運動量固有関数をもっと簡単に表わすことができる（§11参照）．つまり，有限領域として，原点を中心として一辺の長さが L の立方体を選び，この立方体の向い合せの面上の対応点でのそれぞれの波動関数の値および壁に垂直なその微係数の値が等しいことを要求するのである．こういう境界条件をとると，遠方での固有関数の位相がもはや任意でなくなるから，もとは連続だった固有値は離散的になる（(8.6) についての議論を参照）．剛体の壁の箱の場合と同様に，〔この場合も〕箱が存在することの効果は，もともと連続的な固有値を離散的にし，さらにこの種の波動関数が規格化できるような有限な体積を与える以外は無視することができる．〔その意味で〕この種の波動関数に，箱の中での規格化を行なったときでも，“連続的”な〔波動関数〕という言葉をひきつづき使ってゆくことにしよう．

10-5 エネルギー固有関数の規格直交性

$\int |u_E(\mathbf{r})|^2 d^3r$ という積分は，離散的固有値を持つ方の組の固有関数に対してはどのような場合にも収斂するが，有限な体積 L^3 の箱の中で規格化すれば，すべての固有関数について収斂する．そのとき，上の積分値が1に等しくなるように u_E の係数を選んで $u_E(\mathbf{r})$ を規格化することができる．

今度は二つの相異なる固有値 E, E' に対応する固有関数が**直交している** ***orthogonal*** ことを示そう；つまり，その固有関数のうちの一つと，他のどれかの複素共役関数とを掛け合わせて二つの関数に共通な定義領域にわたって積分したものが零になるというのである．(10.2) によって，$u_{E'}{}^*(\mathbf{r})$ は，次の方程式を満たす．（ただし，この

場合にもやはりVは実数量と仮定する)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]u_{E'}^*(\mathbf{r})=E'u_{E'}^*(\mathbf{r}) \tag{10.3}$$

この E' は、先の物理的解釈に従って実数と仮定してあるが，このことは後で確かめられることである．方程式 (10.2) に $u_{E'}^*$ を，(10.3) に u_E を掛けて，各々 L^3 の体積について積分し，そうして得られた方程式の差をつくると，Vを含んだ項は打ち消し合って，残りの項は次のようになる．

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int(u_{E'}^*\nabla^2u_E-u_E\nabla^2u_{E'}^*)d^3r=(E-E')\int u_{E'}^*u_Ed^3r \tag{10.4}$$

(10.4) の左辺の積分は，Green の定理によって立方体の表面Aの上での面積分になおすことができて

$$\int(u_{E'}^*\nabla^2u_E-u_E\nabla^2u_{E'}^*)d^3r=\int\nabla\cdot(u_{E'}^*\nabla u_E-u_E\nabla u_{E'}^*)d^3r$$
$$=\int_A(u_{E'}^*\nabla u_E-u_E\nabla u_{E'}^*)_n dA \tag{10.5}$$

となる．ただし括弧の後の添字nは，面積要素dAの外向き法線方向のベクトル成分を表わしている．周期的境界条件を置いたため，各々の波動関数と面に垂直なその微係数とは立方体の向い合わせの面の対応点で互いに同じ値を持ち，したがって外向け法線方向の微係数は向い合わせの面で互いに反対の符号を持つわけだから，(10.5) の面積分は零になる．こうして $E\neq E'$ のときは，(10.4) から u_E と $u_{E'}$ とが直交することがわかる．[1]

一つのエネルギーの固有値Eに，二つ以上の一次独立な固有関数 $u_1, u_2, \cdots$ が対応するとき，その固有値Eは**縮退している** *degenerate* と言う．縮退している幾つかの固有関数から，互いに直交する一次結合をつくるにはいろいろ違ったやり方が可能である．たとえば，$u_a=a_1u_1+a_2u_2$ は係数 a_1 と a_2 とを

$$\frac{a_1}{a_2}=-\frac{\int u_1^*u_2d^3r}{\int|u_1|^2d^3r}$$

1) 明らかにこの直交性の証明は離散的な組の固有関数には，箱を使わなくても適用することができる．この場合 u および u^* は遠方で急激に零に近づき，半径無限大の球の表面でとった面積分は零になるからである．また，連続な方の組のエネルギー固有関数も箱を使って規格化しないでも扱うことができる．(§11 の運動量固有関数が連続的な組の場合も同様である)

となるように選べば，u_1 に直交さすことができる．こう選んでも u_a を規格化するのにはこまらないし，また u_a はやはり固有値Eを持つエネルギーの固有関数になっている．明らかに，互いに直交する一次結合の選び方は一通りではない．この手順を進めていけば，たとえ固有値の幾つかが縮退していても，エネルギーの固有関数はすべて互いに直交させることができる．

このように，各々規格化されしかも互いに直交する一組の固有関数は，関数の**規格直交系** *orthonormal set of function* とよばれている．縮退がない固有関数の規格直交系を指定する関係は

$$\int u_{E'}{}^*(\mathbf{r})u_E(\mathbf{r})d^3r=\delta_{EE'} \tag{10.6}$$

で与えられる．$\delta_{EE'}$ は Kronecker の δ 記号で，$E=E'$ のときは 1，$E\neq E'$ のときは零に等しい．もし縮退があれば，(10.6) の代わりに

$$\int u_{E's'}{}^*(\mathbf{r})u_{Es}(\mathbf{r})d^3r=\delta_{EE'}\delta_{ss'} \tag{10.7}$$

としなければならない．この添字 s は互いに直交する縮退固有関数を区別するものである．しかし縮退のあるときも，わざわざ s を取り出して示さないで，(10.6) をそのまま使い，その指数の中に s を含ます方が便利なことが多い．

10-6　エネルギー固有値の実数性

ここまでくればこれまで仮定しておいたEが実数であることを，直接示すことができる．(10.2) の方程式に $u_E{}^*$ を掛け，体積 L^3 の立方体で積分する．u_E が規格化されていれば，この結果は

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\int u_E{}^*\nabla^2u_Ed^3r+\int V(\mathbf{r})|u_E|^2d^3r$$

となり，これは，期待値を使えば $(1/2m)\langle\mathbf{p}^2\rangle+\langle V\rangle$ として表わされる．

積分の第二項 $\langle V\rangle$ は，被積分関数が実数である以上実数である．また，第一項は部分積分を使えば明らかに実数であることがわかる．すなわち

$$-\int u_E{}^*\nabla^2u_Ed^3r=\int(\nabla u_E{}^*)\cdot(\nabla u_E)d^3r-\int_A u_E{}^*(\nabla u_E)_n dA$$

右辺の体積分が実数であることは明らかであり，面積分は，((10.5) と同じように) 箱の壁での周期的境界条件により零となる．注意すべきことは，ここから $\langle\mathbf{p}^2\rangle$ が負にな

りえないということがわかることである．

10-7 エネルギー固有関数による展開

この節の始めの方で述べたように，全エネルギー演算子の固有関数の全部は，それらを使って任意の連続関数を展開することができるという意味で，関数の一つの完全系をつくっているという数学的な仮定をおくことにする．そうすれば，ある特定の時刻における任意の波動関数をとり，それが L^3 の箱の中で規格化されており，かつ周期的な境界条件に従うものとすると，仮定によって

$$\psi(\mathbf{r})=\sum_E A_E u_E(\mathbf{r}) \tag{10.8}$$

という展開が存在することになり， この仮定から $\mathbf{r}$ に無関係な係数 A_E を一意的にきめることができる．

(10.8) の展開における係数を決めるには，両辺に $u_{E'}^*$ を掛け，箱全体について積分すればよい．$\sum_E$ と $\int$ との順序を入れかえることができるものと仮定すれば，[1] (10.6)，(10.7) の方程式を使って

$$\int u_{E'}^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d^3r=\sum_E A_E\int u_{E'}^*(\mathbf{r})u_E(\mathbf{r})d^3r=\sum_E A_E\delta_{EE'}=A_{E'} \tag{10.9}$$

となる．

10-8 完　　備　　性

A_E を (10.9) のように表わしておいて，それを元の (10.8) にもう一度代入すれば

$$\psi(\mathbf{r})=\sum_E\left[\int u_E^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d^3r'\right]u_E(\mathbf{r})$$

となり，順序を入れかえると

$$\psi(\mathbf{r})=\int\psi(\mathbf{r}')\left[\sum_E u_E^*(\mathbf{r}')u_E^*(\mathbf{r})\right]d^3r' \tag{10.10}$$

となる．$\psi(\mathbf{r})$ は任意の連続関数だから，方程式 (10.10) は被積分関数の括弧の中の部

1) 和と積分との順序の入れかえが保証されるかどうかは，原理的には各々の場合について一々調べてみなければならないことである．その際必要な細々した数学的な議論はこの書物の扱うべき範囲外なので，物理的に興味のある状況では，いつでもこのような入れかえが許されるものと仮定しておくことにしよう．

分が $\mathbf{r}=\mathbf{r}'$ でない場合は零になるということを意味している．さもなければ，(10.10)によって与えられた ψ の点 $\mathbf{r}$ での値は，他の $\mathbf{r}'\neq\mathbf{r}$ における ψ の値が変ったときに変化することになり，ψ が任意の形をとり得るという仮定に反することになる．さらに括弧の中を積分したものは積分の領域が $\mathbf{r}=\mathbf{r}'$ の点を含んでいるときは1とならねばならない．これから次の関係が得られる．

$$\mathbf{r}'\neq\mathbf{r}\ \text{であれば，}\ \sum_E u_E{}^*(\mathbf{r}')u_E(\mathbf{r})=0\ ;$$

$$\text{積分領域が点}\ \mathbf{r}'=\mathbf{r}\ \text{を含んでおれば，}\ \int\sum_E u_E{}^*(\mathbf{r}')u_E(\mathbf{r})d^3r'=1. \tag{10.11}$$

(10.11) の方程式は，直交規格関数 $u_E(\mathbf{r})$ の**完備性** *closure property* を示しているものであるが，〔上の導き方からわかるように，〕その直交関数系がたまたまエネルギー固有関数であるかどうかにかかわらず，この関係は方程式 (10.8) の形で表わされた関数の完全性を使って直接導かれるものなのである．

10-9　確率関数と期待値

この節の始めに示した第二，第三の物理的な要請によると，全エネルギーを正確に測ったときの結果として得られるのは，エネルギーの固有値だけであり，粒子が波動関数 ψ で記述されるときに，ある特定の固有値 E を〔測定結果として〕見出す確率は $|A_E|^2$ に比例することになる．この比例因子が1であることは容易にわかる．というのは，エネルギーの確率関数として

$$P(E)=|A_E|^2 \tag{10.12}$$

と置けば，ψ が規格化されていれば，(10.11) を使って

$$\begin{aligned}\sum_E P(E)&=\sum_E\int u_E{}^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d^3r\int u_E(\mathbf{r}')\psi^*(\mathbf{r}')d^3r'\\&=\iint\psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r})\left[\sum_E u_E{}^*(\mathbf{r})u_E(\mathbf{r}')\right]d^3rd^3r'\\&=\int|\psi(\mathbf{r})|^2d^3r=1\end{aligned}$$

となり，すなわち $P(E)$ の和がそのまま1となるからである．

また，この確率関数からエネルギーの平均値，言いかえれば期待値を計算することもできる．

$$\langle E\rangle=\sum_E EP(E)=\sum_E\int Eu_E{}^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d^3r\int u_E(\mathbf{r}')\psi^*(\mathbf{r}')d^3r' \qquad (10.13)$$

$Eu_E{}^*(\mathbf{r})$ を（10.3）で置きかえれば，（10.13）の始めの積分に二度部分積分を繰り返し，このとき出てくる面積分がともに u_E と ψ の周期的境界条件のため零となって

$$\int Eu_E{}^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d^3r=\int\psi(\mathbf{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]u_E{}^*(\mathbf{r})d^3r$$
$$=\int u_E{}^*(\mathbf{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r})d^3r$$

となる．そこで方程式（10.11）を使うと，結局方程式（10.13）は次のようになる．

$$\langle E\rangle=\sum_E\int u_E{}^*(\mathbf{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r})d^3r\int u_E(\mathbf{r}')\psi^*(\mathbf{r}')d^3r'$$
$$=\iint\psi^*(\mathbf{r}')\left\{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r})\right\}\left[\sum_E u_E{}^*(\mathbf{r})u_E(\mathbf{r}')\right]d^3rd^3r'$$
$$=\int\psi^*(\mathbf{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r})d^3r \qquad (10.14)$$

（10.14）の結果は，ある演算子の期待値はその演算子を $\psi^*(\mathbf{r})$ と $\psi(\mathbf{r})$ との間に挟み，ψ の方にだけ作用するものとして $\mathbf{r}$ について積分すれば得られるものだとの§7の予想を裏付けるものである．

10-10 Schrödinger 方程式の一般解

ポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{r})$ が t に無関係のとき，ある特定の時刻での Schrödinger の方程式（6.16）の解が知られていれば，任意の時刻での解の形は直ぐに書き下すことができる．今，ある時刻 t での $\psi(\mathbf{r},t)$ をエネルギー固有関数で展開する．その場合，展開係数は t に関係することになる．

$$\psi(\mathbf{r}\cdot t)=\sum_E A_E(t)u_E(\mathbf{r}), \qquad A_E(t)=\int u_E{}^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t)d^3r \qquad (10.15)$$

（10.15）を波動方程式（6.16）に代入すると

$$i\hbar\sum_E u_E(\mathbf{r})\frac{d}{dt}A_E(t)=\sum_E A_E(t)Eu_E(\mathbf{r}) \qquad (10.16)$$

となり，u_E の規格化直交性により（10.16）は

$$i\hbar\frac{d}{dt}A_E(t)=EA_E(t)$$

と同等である．これはすぐ積分できて

$$A_E(t)=A_E(t_0)e^{-iE(t-t_0)/\hbar} \tag{10.17}$$

となる．これから $P(E)=|A_E(t)|^2=|A_E(t_0)|^2$ は時間がたっても変化しないことがわかる．

こうして，もし $\psi(\mathbf{r},t)$ がある時刻 $t=t_0$ で知られているなら，任意の時刻 t での解は (10.15)，(10.17) を使って次のようにかける．

$$\psi(\mathbf{r},t)=\sum_E A_E(t_0)e^{-iE(t-t_0)/\hbar}u_E(\mathbf{r}) \tag{10.18}$$

$$A_E(t_0)=\int u_E^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}',t_0)d^3r'$$

すなわち

$$\psi(\mathbf{r},t)=\int\left[\sum_E u_E^*(\mathbf{r}')u_E(\mathbf{r})e^{-iE(t-t_0)/\hbar}\right]\psi(\mathbf{r}',t_0)d^3r' \tag{10.19}$$

(10.18) の解は前に ψ を $\mathbf{r}$ と t とに分離した場合に得た (8.3) の一次結合に他ならない．

11 ⊡ 運動量の固有関数

前節の初めで述べた一般的な考え方を適用する第二の都合のよい例は，運動量の演算子 $-i\hbar\nabla$ の固有関数である．この固有関数はまた，物理的に興味のある問題を解く場合にかなり有用なものである．

11-1　固有関数の形

運動量の固有関数は

$$-i\hbar\nabla u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})=\mathbf{p}u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \tag{11.1}$$

すなわち，

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})=p_xu_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}),\qquad -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})=p_yu_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})=p_zu_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$$

という三つの固有値方程式の解で，その形は，C を規格化定数とすれば

$$u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})=C\exp\frac{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}{\hbar}$$

である．

§6で見たように，$\mathbf{p}$ の代わりに伝播ベクトル $\mathbf{k}=\mathbf{p}/\hbar$ を使う方が都合がよいから，これを使って，上の運動量の固有関数を書き直せば

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=C\exp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \tag{11.2}$$

となる．これらは固有値 $\hbar\mathbf{k}$ を持つ運動量演算子の固有関数である．

11-2 箱を用いた規格化

§10で論じたエネルギーの固有関数の場合と同様に，$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ の定義領域を原点を中心とした任意に大きい，しかし有限な体積 L^3 の立方体の箱に制限し，その壁のところで $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は周期的境界条件に従うものとすることができる．このとき $C=L^{-\frac{3}{2}}$ と置けば $u_{\mathbf{k}}$ を規格化できるが，同時に $\mathbf{k}$ は任意の実数値をとるベクトルではなくなり，その成分の値は，n_x, n_y, n_z を正負の整数または零として次の値に限られることになる．

$$k_x=\frac{2\pi n_x}{L},\qquad k_y=\frac{2\pi n_y}{L},\qquad k_z=\frac{2\pi n_z}{L} \tag{11.3}$$

隣り同志のベクトル $\mathbf{k}$ やそのエネルギーの固有値 $\hbar^2\mathbf{k}^2/2m$ の間隔は，L を十分大きくすれば幾らでも小さくすることができる．そこで，いつでも計算の最後の段階で $L\to\infty$ の極限をとるものと仮定しておく．

運動量の固有関数 (11.2) は，どこでも零になることはないから，完全剛体の壁を持つ箱の中には閉じ込めてしまうことはできないことは注目すべきことである．これは，古典的な立場から見れば，剛体壁で反射された粒子の運動量が保存されないという古典論での事情に類似のものである．一方，周期的境界条件を持った箱は，無限に広い全空間を隣り合わせてならんでいる立方体に分かち，すべての波動関数は全空間にわたり三つの直交軸の各方向に，L の周期を持っているとするのと同等である．この空間の周期性を古典的な事情にひきうつして考えれば，壁を通過する粒子は，ある壁に衝突して壁の反対側の対応点に前と同じ運動量ベクトルを持って現われる粒子と同じものだと見ることができよう．

運動量の固有関数

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=L^{-\frac{3}{2}}\exp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \tag{11.4}$$

の規格直交性も，すぐ確かめることができる．体積 L^3 にわたって次の積分をやれば，(11.3) を使って

$$\int u_{\mathbf{l}}^*(\mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3r=\frac{1}{L^3}\int_{-\frac{1}{2}L}^{\frac{1}{2}L}e^{i(k_x-l_x)x}dx\int_{-\frac{1}{2}L}^{\frac{1}{2}L}e^{i(k_y-l_y)y}dy\int_{-\frac{1}{2}L}^{\frac{1}{2}L}e^{i(k_z-l_z)z}dz$$

$$=\delta_{k_xl_x}\delta_{k_yl_y}\delta_{k_zl_z}\equiv\delta_{\mathbf{kl}} \tag{11.5}$$

となる．ただし，δ は Kronecker の δ 記号である．また直交性は，§10 でエネルギー固有関数の直交性を導いたような一般的方法によっても示すことができる（(10.4) 参照)．

11-3 Dirac の δ 関数

連続な固有関数の組は，周期的境界条件を持った箱を使わなくても（この箱はこの固有関数の固有値を任意に小さな間隔をもった離散的な組にする役割を果していた）取り扱うことができるということを§10 で述べておいた．Dirac の δ 関数[1] を使って，運動量の固有関数について，このことを具体的に示すことができる．δ 関数は

$$x\neq0 \text{ のとき：}\quad \delta(x)=0 \tag{11.6}$$

$$\text{積分領域が } x=0 \text{ を含むとき：}\quad \int\delta(x)dx=1$$

という関係で定義することができる．また，$x=0$ で連続な任意の関数 $f(x)$ に対して

$$\int f(x)\delta(x)dx=f(0) \tag{11.7}$$

という方程式が成り立つものとして定義しても同じことである．ただしこの場合も，積分領域は点 $x=0$ を含むものとする．

(11.6) と (10.11) あるいは (11.7) と (10.10) とを比べると明らかなように，(10.10) の括弧の中は δ 関数を使って次のように表わすことができる．

$$\sum_E u_E^*(\mathbf{r}')u_E(\mathbf{r})=\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')\equiv\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{11.8}$$

(11.8) と (10.6) とを比べてみると，完備性というのは固有値についての和に関する

1) P. A. M. Dirac, "The Principles of Quantum Mechanics." (Oxford. New York, 4 th. ed., 1958)：邦訳：朝永，他訳「量子力学」(岩波書店，1968) の第15節をみよ．

固有関数の一種の規格直交性であるということができることがわかる.

11-4 δ 関数の表わし方

(11.6) または (11.7) という定義をみると, $\delta(x)$ は強い特異性を持った関数であることがわかる.[1] 定性的には, それは $x=0$ を除く他のすべての場所で零であり, $x=0$ のところでは非常に大きくて, それと x 軸との間の面積は有限で1に等しくなっているような関数であると考えておいてよい. もっと形式的には, ある解析関数列の極限として, いろいろ違ったやり方で表わすことができる.

これらの中のある特定なものにすぎないが, 非常に便利な表わし方は, x の関数として $(\sin gx)/\pi x$ を使うものである. ただし, g は正の実数である. この関数は, $x=0$ では g/π で, 周期 $2\pi/g$ で振動しており, $|x|$ が増えるにつれて振巾は減少していき, また $-\infty$ から $+\infty$ まで積分すれば, g の価に無関係に1となる. だからこの関数で, $g\to\infty$ とした極限は, δ 関数のあらゆる性質をそなえていることになる: すなわち $x=0$ では無限大となり, 積分をすれば1となる. さらに, $x=0$ 付近を除いては限りなく早い周期で振動するということは, この関数を含む積分に寄与するのは, 実は $x=0$ の近傍だけだということを意味する. だから

$$\delta(x)=\lim_{g\to\infty}\frac{\sin gx}{\pi x} \tag{11.9}$$

と置いてもよいことになる.

11-5 δ 関数を用いた規格化

δ 関数の表示 (11.9) を使って, (11.5) のような規格化直交積分を作ることができる. ただしこのときには, 箱での規格化をしないで, 固有関数は全空間にわたり, あらゆる実ベクトル $\mathbf{k}$ に対して (11.2) の形を持っていても構わないのである. 積分は

$\int u_l^*(\mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3r$ 三つの積分であり, その一つ一つは δ 関数を使って書き表わすこ

---

1) δ 関数に対する厳密な数学的基礎づけは, L. Schwartz によって与えられている. それによれば, δ 関数は十分性質のよい検定関数の集合に作用する一種の線型汎関数〔linear functional〕とみなすことができる; つまり, 方程式 (11.7) の左辺は $\delta[f]$ と書くことができるわけである. 詳しい議論については, 次のものを見られたい. M. J. Lighthill, "Introduction to Fourier Analysis and Generalized Functions" (Cambridge, New York, 1958): A. Messiah, "Quantum Mechanics" vol. I. App. A. (Interscience, New York, 1961)

とができて

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k_x-l_x)x}dx=\lim_{g\to\infty}\int_{-g}^{g} e^{i(k_x-l_x)x}dx$$
$$=\lim_{g\to\infty}\frac{2\sin g(k_x-l_x)}{k_x-l_x}$$
$$=2\pi\delta(k_x-l_x) \qquad (11.10)$$

となる．したがって，無限に広い空間での〔規格化された〕運動量固有関数は

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=(8\pi^3)^{-\frac{1}{2}}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \qquad (11.11)$$

と書くことができ，この場合の規格化直交関係は

$$\int u_{\mathbf{l}}^*(\mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3r=\delta(k_x-l_x)\delta(k_y-l_y)\delta(k_z-l_z)\equiv\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{l}) \qquad (11.12)$$

となる．

運動量固有関数を箱で規格したときも δ 関数で規格化したときも同じ結果が出てくるということも，§12 で典型的な問題を扱うとき示すことにしよう．

11-6 δ 関数の性質

δ 関数はその特異性のために，ある計算の最後の結果自身にはなり得ないもので，ただその引数について何度も積分を行なうという立前にのみに意味があるのだということは注意すべき重要なことである．この立前をとることにして，δ 関数の間の関係式を幾つか書きならべることができる．[1]

$$\delta(x)=\delta(-x)$$
$$\delta'(x)=-\delta'(-x)$$
$$x\delta(x)=0$$
$$x\delta'(x)=-\delta(x) \qquad (11.13)$$
$$\delta(ax)=a^{-1}\delta(x), \qquad a>0$$
$$\delta(x^2-a^2)=(2a)^{-1}[\delta(x-a)+\delta(x+a)], \qquad a>0$$
$$\int\delta(a-x)\delta(x-b)dx=\delta(a-b)$$
$$f(x)\delta(x-a)=f(a)\delta(x-a)$$

1) P. A. M. Dirac, 前掲書 p. 60 (邦訳書，78頁)

ここの ′ はその引数に関する微分を表わす.

これらの関係式の中で初めの 6 つは連続で微分可能な関数 $f(x)$ を両辺に掛けて, x についての積分をとれば確かめることができる. たとえば, (11.13) の 4 番目の式では

$$\int f(x)x\delta'(x)dx = -\int \delta(x)\frac{d}{dx}[xf(x)]dx$$

$$= -\int \delta(x)[f(x)+xf'(x)]dx = -\int f(x)\delta(x)dx$$

となる. ただし, このときの部分積分で出てくる項は零になる. つまり, 被積分関数の中の $x\delta'(x)$ という項は, その代わりそこに $-\delta(x)$ があるのと同じ結果になるのである. 同様に (11.13) の 7 番目の式は, 両辺に $f(a)$ または $f(b)$ を掛け, a または b について積分したときに両辺で同じ結果が得られるという意味である. 最後の式は両辺を x, a のどちらかについて積分してみれば証明される.

11-7 完　　備　　性

運動量固有関数の完備性については, §10 でエネルギー固有関数に対して行なったような完全性の仮定の助けを借りなくとも, 箱または δ 関数による規格化を使って確かめることができる. 箱で規格化したときは, (11.8) の左辺にあたるものは

$$\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}')u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$= L^{-3}\sum_{n_x=-\infty}^{\infty}\sum_{n_y=-\infty}^{\infty}\sum_{n_z=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i[n_x(x-x')+n_y(y-y')+n_z(z-z')]/L}$$

となり, この式は L が十分大きい極限では容易に計算することができる. つまり, その場合には, 各々の n が単位づつ変化した際の加えるべき項の変化は無視しうる程度に小さいから, たとえば n_x を連続的な変数と見なして $\sum_{n_x=-\infty}^{\infty}$ を $\int_{-\infty}^{\infty} dn_x = (L/2\pi)\int_{-\infty}^{\infty} dk_x$ でおき代えることができる. その結果, 次のようになる.

$$\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}')u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\xrightarrow[L\to\infty]{} (8\pi^3)^{-1}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i[k_x(x-x')+k_y(y-y')+k_z(z-z')]}dk_x dk_y dk_z$$

$$= \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') = \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad (11.14)$$

δ 関数で規格化したときも同様の計算をすることができる. その場合は (11.11)

と (11.10) とから

$$\int u_{\mathbf{k}}{}^*(\mathbf{r}')u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3k=\iiint u_{\mathbf{k}}{}^*(\mathbf{r}')u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})dk_xdk_ydk_z=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad (11.15)$$

完備性の関係の式 (11.14) あるいは (11.15) は，運動量固有関数が固有値 $\mathbf{k}$ についての和または積分についても規格化直交性をもつと同時に位置ベクトル $\mathbf{r}$ の積分についても規格化直交性のあることを示している.

11-8　運動量固有関数による展開

任意の連続関数 $\psi(\mathbf{r})$ は δ 関数を使って

$$\psi(\mathbf{r})=\int\psi(\mathbf{r}')\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d^3r' \quad (11.16)$$

と書き表わすことができる．この $\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ を (11.14) の左辺で置き換えると

$$\psi(\mathbf{r})=\int\psi(\mathbf{r}')\sum_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}{}^*(\mathbf{r}')u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3r'=\sum_{\mathbf{k}}A_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (11.17)$$

$$A_{\mathbf{k}}=\int u_{\mathbf{k}}{}^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d^3r'$$

となる．同様に $\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ を (11.15) で置き換えると，同じ A_k の表式を使って

$$\psi(\mathbf{r})=\int\psi(\mathbf{r}')\int u_{\mathbf{k}}{}^*(\mathbf{r}')u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3kd^3r'=\int A_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3k \quad (11.18)$$

となる．(11.17) と (11.18) から，箱あるいは δ 関数で規格化した運動量固有関数のどちらを使っても，任意関数を展開し得ることがわかる.[1]

11-9　確率関数と期待値

規格化された波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ に付随する運動量の確率関数は $|A_{\mathbf{k}}|^2$ に比例し，その比例因子は1である．なぜなら

$$P(\mathbf{k})=|A_{\mathbf{k}}|^2 \quad (11.19)$$

とおくと，(10.12) で E について和をとったときと比べればすぐわかるように，箱による規格化，δ 関数による規格化のそれぞれの場合について

$$\sum_{\mathbf{k}}P(\mathbf{k})=1, \qquad \int P(\mathbf{k})d^3k=1 \quad (11.20)$$

---

1) こういう結果は，厳密には証明しなかったが Fourier 級数および，Fourier 積分による関数の展開可能性についての数学上の定理と同等のものである.

が成り立つからである.

箱で規格化したときの運動量の期待値は

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \hbar \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} P(\mathbf{k}) = \hbar \sum_{\mathbf{k}} \int \mathbf{k} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3r \int u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \psi^*(\mathbf{r}') d^3r' \quad (11.21)$$

(11.2) の複素共役式を使えば, $\mathbf{k}u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ を $i\nabla u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ で置き換えることができるから, (11.21) の初めの積分は部分積分することができ, そのときでてくる表面積分は ψ と $u_{\mathbf{k}}^*$ とについての周期的境界条件によって零となる. そこで (11.14) と (11.21) とを使って

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p} \rangle &= -i\hbar \sum_{\mathbf{k}} \int u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) d^3r \int u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \psi^*(\mathbf{r}') d^3r' \\ &= -i\hbar \iint \psi^*(\mathbf{r}') [\nabla \psi(\mathbf{r})] \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') d^3r d^3r' \\ &= -i\hbar \int \psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) d^3r \end{aligned} \quad (11.22)$$

となり, これは (7.8) の第二の式と一致する.

δ 関数の規格化を使う場合でも, 部分積分の結果である表面積分が, 半径無限大の球の上でとられるということ以外, 計算は細部に至るまで今と全く同じである；そしてその表面積分は ψ が遠方で非常に小さくなるため零となる. これは ψ が規格化されているという想定と一致するものである；もしそうでなければ $\int P(\mathbf{k}) d^3k$ も $\langle \mathbf{p} \rangle$ も物理的に何の意味も持たないわけである. この場合も計算の結果は (11.22), および (7.8) と同じである.

12 ◻ 自由な波束の一次元運動

一つの (外力が働いていない) 自由粒子の一次元の運動は Schrödinger の波動方程式 (6.8) によって記述される. この運動を調べることは§10 および§11 で行なってきた固有関数による展開方法の興味ある応用を与えることになる. まず第一段として, (3.1) の不確定性の積 $\Delta x \cdot \Delta p$ の取り得る最小値を求め, 次に一次元の波束で, この最小値に対応している可能な形を求めることにする. ただしこれらはすべてある確定した時刻での話である. 大体, この最小波束は, 粒子に外力が働く場合も働かぬ場合も全く同じ構造をしている. というのはこの波束の形は, V が何であろうと Schrödinger

方程式の解に対する一つの初期条件とみなすことができるものにすぎないからである．しかし，他の時刻における ψ を見出すのに必要な解析的な計算上の手続きが，外力の働いていない粒子にあっては特に簡単になるのである．

12-1 不確定性の積の最小値[1]

不確定性の積 $\Delta x\cdot\Delta p$ の最小値を見出すためには，まず $\Delta x, \Delta p$ が何を意味するのかということを定義せねばならない．これには，いろいろの表わし方が可能であるが，解析的に最も扱いやすいのは，平均からのずれの二乗平均の平方根をとったものである．ただし，この“平均”という言葉は，§7の期待値を意味するものであって，式で書けば

$$(\Delta x)^2=\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle=\langle x^2\rangle-\langle 2x\langle x\rangle\rangle+\langle\langle x\rangle^2\rangle=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2$$

$$(\Delta p)^2=\langle(p-\langle p\rangle)^2\rangle=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2 \tag{12.1}$$

となる．[2] この式は，§7の期待値の定義からすぐ出てくるものである．ここで

$$\alpha\equiv x-\langle x\rangle \qquad \beta\equiv p-\langle p\rangle=-i\hbar\left[\frac{d}{dx}-\left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle\right] \tag{12.2}$$

とおけば

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\alpha^2\psi dx\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\beta^2\psi dx$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}(\alpha^*\psi^*)(\alpha\psi)dx\int_{-\infty}^{\infty}(\beta^*\psi^*)(\beta\psi)dx \tag{12.3}$$

方程式 (12.3) における α についての積分の書き換えには問題がないが，β についての積分の同様な書き換えは部分積分の結果である．ただし，その際 ψ が規格された波束であって，$x=\pm\infty$ で零になることを思い出せばよい．

ところで，不等式

---

1) W. Heisenberg, "The Physical Principles of the Quantum Theory." pp. 17～19. (University of Chicago Press, Chicago 1930)；邦訳：玉木・遠藤・小出共訳：「量子論の物理的基礎」(みすず書房，昭29) 21頁をみよ．

2) Δx と Δp は ψ からそれぞれ別々に計算されていることに注意．つまり，x と p に対するある種の“結合確率関数”の存在の可能性は考慮していない．この点については P. Suppes, *Phil. Sci.*, 28, 378 (1961) を見よ．

$$\int\left|f-g\frac{\int fg^*dx}{\int |g|^2dx}\right|^2dx\geqq 0$$

は，積分がすべて $x=-\infty$ から $x=+\infty$ についてとられているとすると，明らかに成立する．ただし，等号が使えるのは，γ を一つの定数として，$f=\gamma g$ という場合に限られている．この不等式からただちに

$$\int |f|^2dx\int |g|^2dx\geqq\left|\int f^*gdx\right|^2$$

という関係が得られ，ここで f を $\alpha\psi$ で，g を $\beta\psi$ で置き換えれば，(12.3) は

$$(\varDelta x)^2(\varDelta p)^2\geqq\left|\int(\alpha^*\psi^*)(\beta\psi)dx\right|^2=\left|\int\psi^*\alpha\beta\psi dx\right|^2 \qquad (12.4)$$

となる．(12.4) の最後の項は次のように書きかえられる．

$$\left|\int\psi^*\left[\frac{1}{2}(\alpha\beta-\beta\alpha)+\frac{1}{2}(\alpha\beta+\beta\alpha)\right]\psi dx\right|^2$$
$$=\frac{1}{4}\left|\int\psi^*(\alpha\beta-\beta\alpha)\psi dx\right|^2+\frac{1}{4}\left|\int\psi^*(\alpha\beta+\beta\alpha)\psi dx\right|^2 \qquad (12.5)$$

左辺の積の中，右辺に移るとき除いた掛け合わされた項は

$$\left(\int\psi^*\alpha\beta\psi dx\right)^*=\int\psi\alpha^*\beta^*\psi^*dx=\int(\beta^*\psi^*)(\alpha\psi)dx=\int\psi^*\beta\alpha\psi dx$$

という関係を使って零になることが示される．この関係は α が実数であることと，普通の部分積分を使ってすぐ確かめることができる．ところで (12.2) から

$$(\alpha\beta-\beta\alpha)\psi=-i\hbar\left[x\frac{d\psi}{dx}-\frac{d}{dx}(x\psi)\right]=i\hbar\psi \qquad (12.6)$$

したがって，(12.4)，(12.5)，(12.6) から

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2\geqq\frac{1}{4}\hbar^2 \quad \text{すなわち} \quad \Delta x\cdot\Delta p\geqq\frac{1}{2}\hbar \qquad (12.7)$$

となる． 等号は (12.5) の右辺の第二項が零のときにのみ成り立つ． これは Heisenberg の不確定性関係の正確な表式に他ならない．ただしこの場合 Δx, Δp は (12.1) のように定義されている．

12-2 最小波束の形

今の導き方から分かるように，不確定性の積が最小になるのは次の二つの条件

$$\alpha\psi = \gamma\beta\psi \tag{12.8}$$

$$\int \psi^*(\alpha\beta + \beta\alpha)\psi dx = 0 \tag{12.9}$$

が満たされたときに限られている．この（12.8）と（12.2）とから，ψ に関する微分方程式

$$\frac{d\psi}{dx} = \left[\frac{i}{\gamma\hbar}(x - \langle x \rangle) + \frac{i\langle p \rangle}{\hbar}\right]\psi$$

が得られるが，これはすぐ積分できて

$$\psi(x) = N \exp\left[\frac{i}{2\gamma\hbar}(x - \langle x \rangle)^2 + \frac{i\langle p \rangle x}{\hbar}\right] \tag{12.10}$$

となる．ただしNは任意定数である．

また，（12.8）を使って，（12.9）の方程式は

$$\left(\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^*}\right)\int \psi^* \alpha^2 \psi dx = 0$$

となる． これが成り立つためには，明らかに γ は純虚数でなければならない． しかも（12.10）で波束を表わそうというのだから，$|\psi|^2$ を積分したものは収斂するはずであり，そのためには γ は負の虚数でなければならない．一方，定数Nの大きさは

$$\int |\psi|^2 dx = 1$$

で ψ を規格化すればきまる．同時に γ も

$$\int (x - \langle x \rangle)^2 |\psi|^2 dx = (\Delta x)^2$$

という条件から定められる．この二つの積分はすぐ計算できて

$$\psi(x) = [2\pi(\Delta x)^2]^{-\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4(\Delta x)^2} + \frac{i\langle p \rangle x}{\hbar}\right] \tag{12.11}$$

となる．

12-3　運動量固有関数による展開係数

一次元の運動量固有関数は，（11.4）および（11.11）の類推から，長さ L の一次元の“箱”で規格化したときは

$$u_k(x) = L^{-\frac{1}{2}} e^{ikx} \tag{12.12}$$

δ 関数で規格化したときは

$$u_k(x)=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}e^{ikx} \tag{12.13}$$

となる．自由粒子に対しては，波動方程式は簡単な（6.8）の形，すなわち

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{12.14}$$

である． だから運動量の固有関数は，またエネルギーの固有関数でもある．[1] したがって，上の波動方程式の解は，どれも（10.8）に類似の形，すなわち

$$\psi(x,t)=\left(\sum_k \text{あるいは} \int dk\right)A_k e^{-iE_kt/\hbar}u_k(x) \tag{12.15}$$

と書くことができる．この A_k は， x とも t とも無関係で， 時間による変化はすべて $e^{-iE_kt/\hbar}$ の中に含まれている． 方程式（12.15）を（12.14）に直接代入してみれば，すぐわかるように

$$E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{12.16}$$

ならば，（12.15）は（12.14）の解になっている．

だから，結局波束の運動を求める問題は，ある時刻，たとえば $t=0$ における展開係数 A_k を求め，それから（12.15）と（12.16）とを使って他の時刻での $\psi(x,t)$ を求めることに帰着する．$t=0$ では（12.15）で指数因子は1となり， A_k を求めるのに（11.17）の第二式を一次元にあてはめたものを使えばよい．つまり

$$A_k=\int u_k^*(x)\psi(x,0)dx \tag{12.17}$$

積分領域は箱で規格化したときは， $x=\pm\frac{1}{2}L$， δ 関数で規格化したときは $x=\pm\infty$ である． 運動量の確率関数 $P(k)=|A_ke^{-iE_kt/\hbar}|^2=|A_k|^2$ は時間に無関係であり， したがってたとえば $\langle p\rangle$ とか $\langle\Delta p\rangle$ とかも常数である．

12-4 最小波束の時間による変化

一つの簡単かつ特定の例として，$\psi(x,0)$ が方程式（12.11）で $\langle x\rangle=\langle p\rangle=0$ とした形をしているとしよう．つまり，この波束は最初 $x=0$ を中心とし，運動量の平均が零で

1） この逆は必ずしも真ではない．（12.16）の方程式を解けば一つの E_k に対して，k（が正のときと負のとき）の二つの解が存在する．

あったということになる．箱によって規格化された場合を考えれば，方程式（12.17）によって

$$A_k=[2\pi L^2(\Delta x)^2]^{-\frac{1}{4}}\int_{-\frac{1}{2}L}^{\frac{1}{2}L}\exp\left[-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}-ikx\right]dx$$

$$=\left[\frac{8\pi(\Delta x)^2}{L^2}\right]^{\frac{1}{4}}e^{-k^2(\Delta x)^2} \tag{12.18}$$

となる．ただしこの計算では，$|x|>\frac{1}{2}L$ からの積分の寄与は無視しうる程度に L は大きくとってあるものと仮定してある．これを（12.15）に代入すれば，一般の時刻 t における波動関数は

$$\psi(x,t)=\sum_k A_k e^{-i\hbar k^2t/2m}u_k(x) \tag{12.19}$$

となる．ただし，$k=2\pi n/L$ で，n は零を含むすべての正負の整数値をとる．§11におけるように，L はいくらでも大きくとれるから，n は連続変数とみなしてよく，$\sum_k$ は $\int dn$ つまり $(L/2\pi)\int dk$ で置き換えられて

$$\psi(x,t)=\left[\frac{(\Delta x)^2}{2\pi^3}\right]^{\frac{1}{4}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-k^2(\Delta x)^2-\frac{i\hbar k^2t}{2m}+ikx\right]dk$$

$$=(2\pi)^{-\frac{1}{4}}\left(\Delta x+\frac{i\hbar t}{2m\Delta x}\right)^{-\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2+\left(\frac{2i\hbar t}{m}\right)}\right] \tag{12.20}$$

となる．したがって位置の確率密度は次のようになる．

$$|\psi(x,t)|^2=\left\{2\pi\left[(\Delta x)^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2(\Delta x)^2}\right]\right\}^{-\frac{1}{2}}$$

$$\exp\left\{-\frac{x^2}{2\left[(\Delta x)^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2(\Delta x)^2}\right]}\right\} \tag{12.21}$$

（12.21）は $|\psi(x,0)|^2$ と同じ形をしているが，ただ $(\Delta x)^2$ が $(\Delta x)^2+\hbar^2t^2$ $4m^2(\Delta x)^2$ で置き換えられている．これは書き換えて，$(\Delta x)^2+(\Delta p)^2t/m^2$ となるから，波束の中心は依然 $x=0$ となっているが，波束の幅は t が零から過去および未来の両方の方向へと進むにつれて段々と拡がっていく．最初の位置の不確定性が小さい程，運動量の不確定性が大きく，波束はより速い勢いで拡がっていくわけである．上式での t に関係した部分，すなわち $t\Delta p/m$ はちょうど Δp の運動量を持つ古典的粒子が時間 t の間に進む距離に他ならない．

δ 関数による規格化を使っても，今の計算の結果には変りはない．ただしこの場合には，方程式（12.18）の A_k には $(L/2\pi)^{1/2}$ を掛けねばならないが，その代わり（12.19）の和はそのまま積分に置き換えられ，$L/2\pi$ の因子がなくなり，最後に（12.19）の u_k には $(L/2\pi)^{1/2}$ という項がかかってくることになる．結局この三つが打ち消し合って方程式（12.10），（12.21）は運動量固有関数の規格の仕方には影響されないことになる．

12-5 古典論的極限

§7でわかったように，波束はその位置と運動量との期待値に関する限り，常に古典的粒子のごとくに運動する．しかしながら，古典力学が運動の記述として使えるのは，個々の問題に応じて考えている時間を通じての波束の拡がりが，無視しうる場合に限られている．

〔その意味で古典論の極限が実際どこで起こっているかを示すパラメーターがあるはずであるが，〕その種のパラメーターの簡単な一例として，半径 a の円軌道を周期 T で運動している古典粒子に対応する波束を考えてみよう．今この波束は，十分狭い範囲に局所化されていて，その拡がりの中でのポテンシャルエネルギーの変化は無視しうるほどだと仮定しておく．この場合，今述べたような波束が T に比べて長い時間経ってもaに比べて小さな範囲にしか拡がらないようなものである限りは，古典的理論を粒子の運動の記述に使うことができるわけである．最初の Δx を $(\hbar t/m)^{1/2}$ 程度にとっておいた場合に，t 程度の時間が経ったときの波束のひろがりは最小になっている．したがって $t \gg T$ のとき，$(\hbar t/m)^{1/2} \ll a$ ということが必要である．この条件をもっと簡単に言い表わせば，粒子の角運動量 $2\pi ma^2/T$ が h に比べて非常に大きいといってもよい．ところで，大抵の原子系では，各電子の角運動量は h の程度なので，十分に局所化されている粒子に対応する波束は一周期の間にひどく拡がってしまうことになって，こういった形での運動の記述は物理的に意味のないものになってしまうのである．

問　　題

1．一次独立ではあるが，必ずしも直交していない三つの縮退した固有関数が与えられている場合，それらの一次結合のうちから互いに直交し，かつ規格化されているものを求めよ．この新しい三

つの一次結合は固有関数になっているか？ もしそうなら，それらは縮退しているか？

2．粒子の一次元の運動に関する限りでは，すべての実数 x' に対して 関数 $u_{x'}(x)=\delta(x-x')$ は一つの完全規格化直交系をつくり， またこの 関数の各々は位置変数 x の固有関数でその固有値は x' であるということを示せ．さらにこれから位置の確率関数をつくり，§7で得られたものと比較せよ．

3．一次元の問題でのポテンシャルエネルギー $V(x)$ が，x の単調増加関数であり，また時間に無関係ならば，すべての実数 x' に対して関数 $u_{V'}(x)=(dV/dx)^{-1/2}_{x=x'}\delta(x-x')$（ただし $V'=V(x')$）はポテンシャルエネルギーの固有値 V' に対応する固有関数で，完全規格直交系をつくることを示せ．また，ポテンシャルエネルギーの確率関数を求め，それが予想されるような性質を持つことを示せ．

4．運動量固有関数の規格化を立方体の箱でなしに，直方体の箱で行なった場合，§11での議論はどのように変更する必要があるか？

5．式（11.9）で与えられたような Dirac の δ 関数の表示を他に二つ求めよ．

6．δ 関数を含む式（11.13）のそれぞれを証明せよ．

7．（11.20）の二つの方程式が正しいということ，すなわち（11.19）．（11.17）で定義されている規格化された ψ の運動量の確率関数は，和または積分をすることによって1になるということを示せ．

8．式（10.19）の被積分関数の括弧内の表式を使えば，ある時刻 t' における ψ を他の時刻 t における ψ であらわすことができる．一次元の場合にこの式を $iG(x',t';x,t)$ とあらわすことにすれば，$\psi(x',t')=i\int G(x',t';x,t)\psi(x,t)dx$ となる．一次元の自由粒子に対しては

$$G_0(x',t';x,t)=-i\left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t'-t)}\right]^{\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{im(x'-x)^2}{2\hbar(t'-t)}\right]$$

となることを示し，ψ が $t=0$ において規格化された最小波束（12.11）の形をしていると仮定して，上の結果を用いて他の時刻 t' における ψ と $|\psi|^2$ とを求めよ．この G_0 は一次元での自由粒子の Green 関数とよばれている．（§36を参照）．

9．同じハミルトニアンの同一のエネルギー固有値に対応する二つの固有関数を $u_1(\mathbf{r})$ および $u_2(\mathbf{r})$ とする；これらは同一の関数でありうるし，あるいは縮退していることもありうる．これらに対して次の関係が成立することを示せ．

$$\int u_1^*(\mathbf{r})(xp_x+p_xx)u_2(\mathbf{r})d^3r=0$$

ただし，運動量演算子 $p_x=-i\hbar(\partial/\partial x)$ はその右側にくる量に作用するものとする．また，この問題と第II章の問題5との関係は何か？

第Ⅳ章　離散的な固有値:束縛状態

第Ⅱ章でつくり上げた理論形式について第Ⅲ章で詳しく調べてきたが，この章ではそれを応用して離散的なエネルギー準位と，それに対応する固有関数を直接計算することにしよう．エネルギーの固有値が連続的に分布している場合は，次の章で取り上げることにする．つまり，この章で問題にするのは粒子が外力（ポテンシャルエネルギー）によって空間のある特定の領域に閉じこめられている束縛状態であって，粒子が無限遠から近づいてきて無限遠へ遠ざかっていく衝突問題は次の章で扱うことにする．

波動方程式（8.2）が，解析的に解けるようになっているポテンシャルエネルギーの関数 $V(\mathbf{r})$ は比較的少数に限られるのだが，この種のポテンシャルエネルギーが重要だというのは，単にそれらの問題自体の興味によるものではなく，しばしばもっと複雑な力学系の近似計算の基礎として役立つということにもよるのである．

13□一次元調和振動子

ある固定した中心に向って，その中心からの変位に比例する引力を受けている質点の一次元の運動は，古典力学の基本的な問題の一つになっている．この調和振動子の運動を調べることが大切なのは，単にこの問題を解くことそれ自身が大切であるばかりでなく，もっと複雑な力学系も，系を構成する粒子間の力が相対的な変位の一次関数になっている限り，運動の基準振動を使って分析することが常に可能で，しかもこれらの基準振動と調和振動とは形式的には同等であるということがあるからである．この種の系でのニュートン的運動方程式が一次であるということは，この系のポテンシャルエネルギーが座標の二次形式になることを意味する．この側面は量子力学にそのままうつされることになり，その結果基準振動形式としての調和振動が量子力学においてもやはり見られることになる．このような意味で，一次元調和振動子は，分子内部や結晶内部での個々の原子の振動といった種類の問題の量子力学的取り扱いには極めて重要になる．さらに，一次元調和振動子は電磁場の量子論への鍵を与えるものなのである．ある空洞内での電

磁場の振動は調和的な基準振動に分解することができ，おのおのの基準振動は振動子型のエネルギー準位（方程式（13.8）を見よ）をもつことになる．角振動数 ω をもつこの系のある特定の基準振動を n 番目の励起状態（n 倍音）に励起するということは，この系のエネルギーが $n\hbar\omega$ だけ増加することを意味し，物理的にはこの振動数の n 個の光子をこの系に付け加えることに対応している（第XIV章を見よ）．

この節では，シュレーディンガー方程式から出発して振動子の問題を解くことにする．ただし，この問題はまた第VI章の行列を使った理論形式から出発して代数的方法によって解くこともできる．調和振動子の重要性は極めて大きいので，§25 でこの行列を使う解法も実行してみせることにする．

13-1　解の漸近的な振舞い

$F=-Kx$ という力は $V(x)=\frac{1}{2}Kx^2$ というポテンシャルエネルギーで表わされるから，（8.5）の方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}+\frac{1}{2}Kx^2u=Eu \tag{13.1}$$

となる．こういう型の方程式を取り扱うには，それをディメンジョンをもたない形に書き直すのが便利である．このためには，ディメンジョンのない独立変数 $\xi=\alpha x$，同じくディメンジョンのない固有値 λ を導入し，（13.1）を次の形においてみる：

$$\frac{d^2u}{d\xi^2}+(\lambda-\xi^2)u=0 \tag{13.2}$$

（13.1）と（13.2）とを比べてみると

$$\alpha^4=\frac{mK}{\hbar^2},\qquad \lambda=\frac{2E}{\hbar}\left(\frac{m}{K}\right)^{\frac{1}{2}}=\frac{2E}{\hbar\omega_c} \tag{13.3}$$

が成り立っていれば，こういう書き換えができるということがわかる．ただし $\omega_c=(K/m)^{1/2}$ は，この場合に対応する古典的調和振動子の角振動数である．

ところで，最初に $\xi\to\pm\infty$ の漸近領域で u が主としてどういう有様になるか調べておけば，（13.2）を解くのが容易になる．[1] ξ が十分大きいところでは（13.2）で主にきいてくる項（ξ^2u のオーダーの項）のみを考えれば，n を任意の有限値をもつとし

1）ここでは A. Sommerfeld, "Wave Mechanics" (Dutton, New York, 1929), 11頁の多項式による解法に従うことにする．

て $u(\xi)=\xi^n e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}$ がその解になっていることは明らかである. §8 の境界条件によれば，このうちで許されるのは冪の指数が負のものだけである．だから，方程式 (13.2) の厳密な解としては，$H(\xi)$ を ξ の有限次の多項式を表わすものとして

$$u(\xi)=H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{13.4}$$

という形のものを予想しておいてよい．方程式 (13.4) を (13.2) に代入すると，$H(\xi)$ に対する方程式として

$$H''-2\xi H'+(\lambda-1)H=0 \tag{13.5}$$

を得る．ただしこの $'$ は ξ に関する微分を意味する．

13-2 エネルギー準位

今，解Hとして

$$H(\xi)=\xi^s(a_0+a_1\xi+a_2\xi^2+\cdots), \qquad a_0\neq 0, \qquad s\geq 0 \tag{13.6}$$

という形のものを求めることにする．$\xi=0$ ではこれは必ず有限である．(13.5) の方程式は ξ のどんな値に対しても成り立っているはずだから，(13.6) をそれに代入したとき，ξ の各冪の係数はどれも 0 とおくことができる．

$$\begin{aligned}
&s(s-1)a_0=0\\
&(s+1)sa_1=0\\
&(s+2)(s+1)a_2-(2s+1-\lambda)a_0=0\\
&(s+3)(s+2)a_3-(2s+3-\lambda)a_1=0\\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\
&(s+\nu+2)(s+\nu+1)a_{\nu+2}-(2s+2\nu+1-\lambda)a_\nu=0
\end{aligned} \tag{13.7}$$

ただし，この ν は一つの整数である．a_0 は零ではあり得ないから，(13.7) の第 1 式から $s=0$ あるいは $s=1$ であることがわかる．第 2 式からは $s=0$ または $a_1=0$, あるいはこの両方共が成り立っていることがわかる．第 3 式では a_2 が a_0 で，第 4 式では a_3 が a_1 でそれぞれ表わされており，一般式を使えば $a_{\nu+2}$ が a_ν で表わされることになる．

§9 でのパリティの議論からわかるように，$u(\xi)$ したがってまた $H(\xi)$ を ξ について偶性か奇性かのいづれかをもつように選ぶことができる．この場合，a_1 および他の奇数添字の係数はすべて零であることが方程式 (13.6) から導かれ，結局波動関数

は$s=0$ あるいは $s=1$ に応じて偶または奇になる．

(13.7) からわかるように，(13.6) の級数で項が有限のところで切れるか無限に続くかは s および固有値 λ をどう選ぶかにかかっている．もしもこの級数が，有限項で切れないとすれば，それが遠方でどういう様子をしめすかは高い冪のところでの係数から推定できる．すなわちこの比をとったものは

$$\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu} \xrightarrow[\nu\to\infty]{} \frac{2}{\nu}$$

で，この比は，nを任意の有限な値とした級数 $\xi^n e^{\xi^2}$ の係数の比と同じになっている．ところがHがこういうふうでは，(13.4) からわかるように $|\xi|$ の大きいところでのuの境界条件は満足されないことになる．

だから，(13.6) の級数は有限のところで切れねばならない．このため

$$\lambda=2s+2\nu+1$$

で，かつこの ν は偶数でなければならない．というのは，もしそうでなければ，$a_0\neq 0$ だから偶数の添字を持った項が無限に続いていくからである．　さらに，sは0かまたは1のいずれかの値をとるから，この二つの値に対応してλは $2\nu+1$, $2\nu+3$ となる．この ν は偶数であるがどちらの場合にしても一つの量子数nを使って

$$\lambda=2n+1, \qquad E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c, \qquad n=0, 1, 2, \cdots \tag{13.8}$$

と表わすことができる．

このnはHに対する級数 (13.6) での $s+\nu$ の最大値になっていることは，方程式 (13.8) および (13.7) からわかる．このnに対応する多項式を $H_n(\xi)$ と書くことにすれば，H_n は ξ についてn次の多項式で，nが偶数，または奇数に応じて全体として偶性または奇性をもつことになる．$e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ は偶関数でかつ節点をもたない以上，H_n に対応する固有関数 $u_n(\xi)$ の偶奇性はnで，n個の節点をもつことになる．

13-3　零点エネルギー

(13.8) のエネルギー準位の無限の列は，1900年 Planck によって要請されていたように等間隔になっており，この結果はまた前期量子論の量子化の規則とも一致している．しかし，基底状態のエネルギー準位は $\frac{1}{2}\hbar\omega_c$ という有限の値を持つ．これは**零点エネルギー** ***zero point energy*** とよばれ，量子力学に特徴的なものである．そして，これが

不確定性原理に関係している事情は，完全剛体壁を持った四角な井戸型のポテンシャルにおける有限な最低エネルギー準位のときと同じである（§9参照）．というのは，Δp および Δx を §12 で定義したような運動量および位置のひろがりの目安を与えるものとすると，全エネルギーは $(\Delta p)^2/m+K(\Delta x)^2$ の程度になる．不確定性関係（3.1）を考慮して，これを最小にする Δp の値は $(Km\hbar^2)^{1/4}$ 程度であることが容易にわかるから，結局最小の全エネルギーの値は $\hbar(K/m)^{1/2}$ すなわち $\hbar\omega_c$ の程度になるのである．

13-4 Hermite の多項式

方程式（13.5）で，$\lambda=2n+1$ とおいた式

$$H_n''-2\xi H_n'+2nH_n=0 \tag{13.9}$$

の解で，n のパリティを持った n 次の多項式は，n 次の **Hermite の多項式** $H_n(\xi)$ *Hermite polynomial* とよばれている．これらの条件は，上の方程式（13.5）の解法から明らかなように H_n を，それにかかる任意定数を除いては一意的に定めてしまう．だからこれらの条件に矛盾しないで H_n を取り扱うやり方が他に何か可能であれば，H_n の性質を細かく調べるには，別に（13.7）の漸化式を使う必要はない．実際，はるかに便利な取り扱い方が可能である．それは，H_n を**母関数** *generating function* $S(\xi,s)$ を使って表わすやり方である：

$$S(\xi,s)=e^{\xi^2-(s-\xi)^2}=e^{-s^2+2s\xi}$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)}{n!}s^n \tag{13.10}$$

方程式（13.10）で，指数関数を s と ξ の冪で展開すれば，s のある与えられた次数の冪にかかってくる ξ の冪の次数は s のそれに等しいか，またはそれより偶数次だけ低いものに限られていることがわかる．だから，こうして定義された $H_n(\xi)$ は n 次の多項式で n の偶奇性を持っている．

この H_n が微分方程式（13.9）を満たしていることを示すために，（13.10）の両辺をまず ξ について，次に s について微分してみよう：

$$\frac{\partial S}{\partial \xi}=2se^{-s^2+2s\xi}=\sum_n\frac{2s^{n+1}}{n!}H_n(\xi)=\sum_n\frac{s^n}{n!}H_n'(\xi)$$
$$\frac{\partial S}{\partial s}=(-2s+2\xi)e^{-s^2+2s\xi}=\sum_n\frac{(-2s+2\xi)s^n}{n!}H_n(\xi)\quad=\sum_n\frac{s^{n-1}}{(n-1)!}H_n(\xi)$$

これら二つの方程式の和の中で，s について同じ冪の項同志を等しいとおけば，それぞれ

$$H_n' = 2nH_{n-1}$$

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1} \tag{13.11}$$

となる．(13.11) から，H_n のみを含む微分方程式をつくってみれば容易にわかるように，そのうち最低階のものは (13.9) になる．だから (13.10) で与えられる H_n は Hermite の多項式である．

H_n やその微係数を計算するには，(13.11) の関係を使ってもよいが，母関数から直接得られる表わし方を使ってもよい．$S(\xi, s)$ を s に関して n 回微分して，$s=0$ とおくと，その結果は (13.10) からわかるように $H_n(\xi)$ のみが残る．どんな関数でも，$f(s-\xi)$ という形をしたものについては

$$\frac{\partial f}{\partial s} = -\frac{\partial f}{\partial \xi}$$

が成り立つから

$$\frac{\partial^n S}{\partial s^n} = e^{\xi^2}\frac{\partial^n}{\partial s^n}e^{-(s-\xi)^2} = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{\partial^n}{\partial \xi^n}e^{-(s-\xi)^2}$$

これによって n 次の Hermite の多項式は次のように表わせる．

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{\partial^n}{\partial \xi^n}e^{-\xi^2} \tag{13.12}$$

(13.12) から，最初の三つの多項式を計算すると次のようになる．

$$H_0(\xi) = 1, \qquad H_1(\xi) = 2\xi, \qquad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

13-5　調和振動子の波動関数

調和振動子の波動関数 (13.4) の

$$u_n(x) = N_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \tag{13.13}$$

を含む積分を計算するのにも母関数が役に立つ．たとえば，$u_n(x)$ を規格化することを考えよう；これは定数 N_n を

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u_n(x)|^2 dx = \frac{|N_n|^2}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 1$$

が成り立つように選ぶことに他ならないが，この右辺の積分は二つの母関数の積を含んだ積分を級数に展開したときの係数として表わされる．つまり

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2+2s\xi}e^{-t^2+2t\xi}e^{-\xi^2}d\xi$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{s^n t^m}{n!m!}\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}d\xi \tag{13.14}$$

この左辺の積分は，すぐに直接計算できて

$$\pi^{\frac{1}{2}}e^{2st}=\pi^{\frac{1}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2st)^n}{n!} \tag{13.15}$$

となる．(13.14) および (13.15) の右辺の級数で，s と t の羃の同じ項同志を等しいとおけば，次の結果を得る．

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty} H_n{}^2(\xi)e^{-\xi^2}d\xi=\pi^{\frac{1}{2}}2^n n!,\\ &\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}d\xi=0, \qquad n\neq m\end{aligned} \tag{13.16}$$

最初の式によって，規格化定数を

$$N_n=\left(\frac{\alpha}{\pi^{\frac{1}{2}}2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{13.17}$$

ととればよいことがわかる．ただし，大きさ1の複素定数の位相因子をかける任意性はまだ残っている．また二番目の式からは，u_n と u_m とは $n\neq m$ ならば互いに直交することがわかる；この結果は，縮退のないエネルギー固有関数に対して§10で得た一般的結果と一致している．というのは，方程式 (13.8) によれば $n\neq m$ ならば $E_n\neq E_m$ となり縮退がないからである．

母関数を補助手段にして計算されるその他の積分のうちで，典型的なものには次のようなものがある．

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n{}^*(x)xu_m(x)dx=\frac{N_n{}^*N_m}{\alpha^2}\int_{-\infty}^{\infty}\xi H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}d\xi$$

次の積分を級数に展開した表式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2+2s\xi}e^{-t^2+2t\xi}\xi e^{-\xi^2}d\xi$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{s^n t^m}{n!m!}\int_{-\infty}^{\infty}\xi H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}d\xi$$

および

$$\pi^{\frac{1}{2}}(s+t)e^{2st}=\pi^{\frac{1}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n(s^{n+1}t^n+s^nt^{n+1})}{n!}$$

の級数を項別に等しいとおくことができる．そこで，(13.17) を使えば次の結果が得られる．

$$\int_{-\infty}^{\infty}u_n{}^*(x)xu_m(x)dx=\begin{cases}\dfrac{1}{\alpha}\left(\dfrac{n+1}{2}\right)^{\frac{1}{2}}, & m=n+1\\ \dfrac{1}{\alpha}\left(\dfrac{n}{2}\right)^{\frac{1}{2}}, & m=n-1\\ 0, & \text{その他の場合}\end{cases}\tag{13.18}$$

13-6 古典論との対応

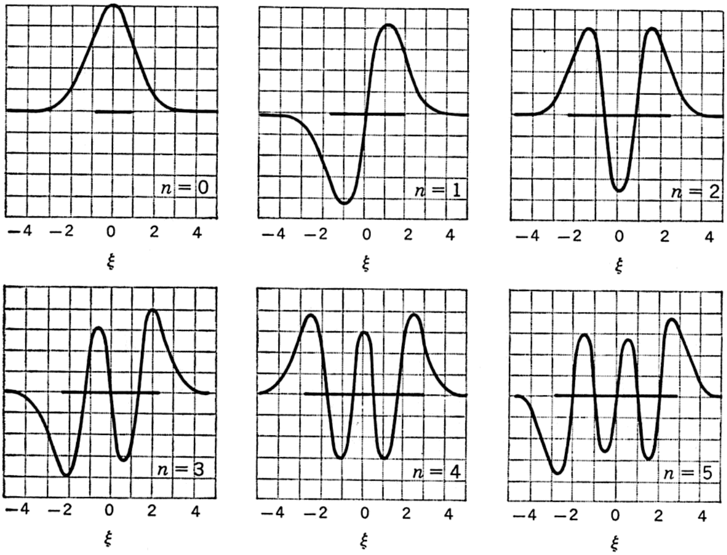
調和振動子の始めの6個の波動関数を描いてみれば，第10図のようになる．定常状態を表わすこれらの波動関数に付随する位置の確率密度 $|u_n|^2$ には，それに対応する古典的調和振動子の密度とほとんど似たところがないことは明らかである．というのは，この古典論で対応する密度というのは，量子力学的な固有値と等しいエネルギーを持つ古典的調和振動子の振幅を ξ_0 とすると，$(\xi_0{}^2-\xi^2)^{-1/2}$ に比例するものであるからである．しかし n が増えるにつれて古典的確率密度と量子的確率密度との一致が急速によくなっていく．第11図は $n=10$ に対する $|u_n|^2$（実線）と全エネルギー $(21/2)\hbar\omega_c$ を持つ古典振動子の位置確率密度（点線）とを描いたものである．主なちがいとしては，$|u_n|^2$ は非常に早く振動しているということだけで，平均をとればこの二つは非常によく一致している．

ポテンシャルエネルギーの期待値は，方程式 (7.6) から求められて

$$\begin{aligned}\langle V\rangle_n&=\int_{-\infty}^{\infty}u_n{}^*(x)\tfrac{1}{2}Kx^2u_n(x)dx\\&=\tfrac{1}{2}K\frac{2n+1}{2\alpha^2}=\tfrac{1}{2}(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_c=\tfrac{1}{2}E_n\end{aligned}$$

となる．ただし $\int x^2|u_n|^2dx$ の計算は，方程式(13.18)を計算したときと同じように母関数を使えばできる．これからわかるよう，どんな値の n に対しても古典振動子の場合と同じく，位置および運動エネルギーの平均はともに全エネルギーの半分になっている．

同様にして，任意の調和振動子の波動関数に対して $\langle x\rangle=\langle p\rangle=0$ を示すことが



第10図 調和振動子の始めの6個の状態に対するエネルギーの固有関数
[L. Pauling–E. B. Wilson, Jr., "Introduction to Quantum Mechanics" (McGraw-Hill, New York, 1935) pp. 74～75 による]

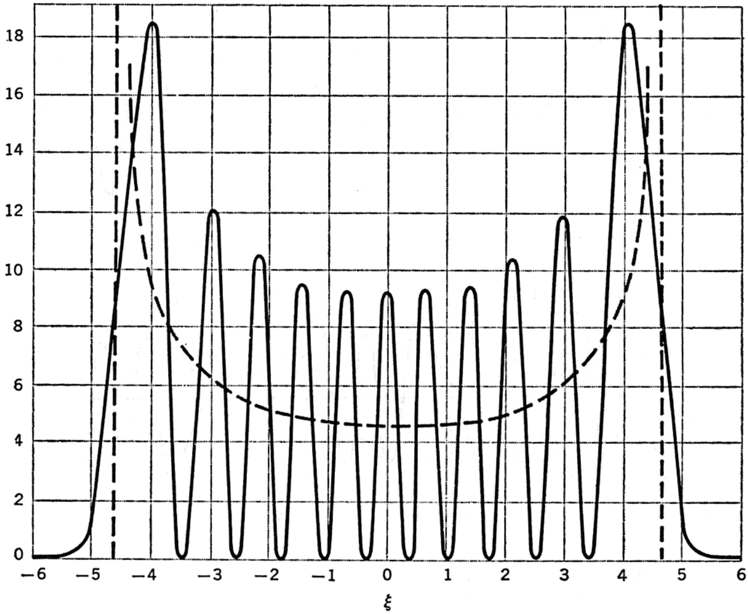
でき，したがって (12.1) から $(\Delta x)^2=\langle x^2\rangle$, $(\Delta p)^2=\langle p^2\rangle$. これからすぐわかるように，不確定性の積は

$$\Delta x\cdot\Delta p=(n+\tfrac{1}{2})\hbar$$

となる．方程式 (12.7) での可能な最小値 $\frac{1}{2}\hbar$ には，この場合，基底状態の固有関数

$$u_0(x)=\frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2} \tag{13.19}$$

が対応しているわけである．このことは (13.19) が最小波束 (12.11) の形をしていることからも予想されることである．つまり，Δx と K および m の間に適当な関係がある場合には，最小波束がそのまま調和振動子の波動方程式の一つの固有関数になるわけである．



第11図　$n=10$ の状態の調和振動子およびそれと同じ全エネルギーをもつ古典的振動子に対する位置の確率密度（それぞれ実線および点線）(L. Pauling-E. B Wilson. Jr.，前掲書 pp. 76 より)

13-7　振動する波束

方程式（10.18）の一般的関係の応用として，調和振動子に対する時間を含む Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\tfrac{1}{2}Kx^2\right)\psi(x,t)$$

の一般解は，定常状態の波動関数によって展開することができて

$$\psi(x,t)=\sum_{n=0}^{\infty}A_nu_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}=e^{-\frac{1}{2}i\omega_ct}\sum_{n=0}^{\infty}A_nu_n(x)e^{-in\omega_ct} \qquad (13.20)$$

となる．ただし，A_n は任意定数である．位相因子 $e^{-\frac{1}{2}i\omega_ct}$ を別にすれば，$\psi(x,t)$ は古典振動子と同じ $2\pi/\omega_c$ を周期とする t の周期関数である．このことから考えられるのは，解として重心が古典的運動の周期で振動しているような波束の形をしたものを求

めることができるはずだ，ということである.[1]

この可能性を検討するために，$t=0$ では（13.20）の ψ は規格化された最小波束（13.19）の形をしていると仮定しよう．ただし，重心は原点から x の正の方向に a だけずれているとする．つまり

$$\psi(x,0)=\sum_{n=0}^{\infty}A_n u_n(x)=\frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2(x-a)^2} \tag{13.21}$$

となる．ある特定の係数 A_m を計算するには，（13.21）に $u_m^*(x)$ をかけて x について積分し，u_n の規格化直交性を使えばよい．

$$A_m=\int_{-\infty}^{\infty}u_m^*(x)\psi(x,0)dx=\frac{N_m^*}{\pi^{\frac{1}{4}}\alpha^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{\infty}H_m(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}e^{-\frac{1}{2}(\xi-\xi_0)^2}d\xi,$$

$$\xi_0\equiv\alpha a$$

右辺の積分の値は，母関数を使って次の積分を展開した二つの級数を項別に等しいとおいて求められる．すなわち

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-s^2+2s\xi}e^{-(\xi^2-\xi\xi_0+\frac{1}{2}\xi_0^2)}d\xi=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{s^n}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)e^{-(\xi^2-\xi\xi_0+\frac{1}{2}\xi_0^2)}d\xi,$$

および

$$\pi^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{4}\xi_0^2+s\xi_0}=\pi^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{4}\xi_0^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(s\xi_0)^n}{n!}$$

から，（13.17）を使って

$$A_n=\frac{\xi_0{}^n e^{-\frac{1}{4}\xi_0^2}}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}}} \tag{13.22}$$

となり，この A_n を（13.20）に代入して，和をとるときに（13.10）の母関数の性質を使えば

$$\psi(x,t)=\frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{1}{2}\xi^2-\frac{1}{4}\xi_0^2-\frac{1}{2}i\omega_c t}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)}{n!}\left(\tfrac{1}{2}\xi_0 e^{-i\omega_c t}\right)^n$$

$$=\frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\exp\left(-\tfrac{1}{2}\xi^2-\tfrac{1}{4}\xi_0^2-\tfrac{1}{2}i\omega_c t-\tfrac{1}{4}\xi_0^2 e^{-2i\omega_c t}+\xi\xi_0 e^{-i\omega_c t}\right)$$

$$=\frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\exp\left[-\tfrac{1}{2}(\xi-\xi_0\cos\omega_c t)^2-i\left(\tfrac{1}{2}\omega_c t+\xi\xi_0\sin\omega_c t-\tfrac{1}{4}\xi_0^2\sin 2\omega_c t\right)\right]$$

---

1) E. Schrödinger, ***Naturwiss.***, **14**, 664 (1926)

となる．この波動関数の絶対値の二乗が位置の確率密度である．

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{\alpha}{\pi^{\frac{1}{2}}}e^{-\alpha^2(x-a\cos\omega_c t)^2}$$

これからわかるように，ψ は振幅 a と古典的振動数とを持って，$x=0$ を中心に始めの形を変えずに振動する波束を表わしている．

$a\to 0$ とすると，ψ は最低エネルギーの固有関数 $u_0(x)e^{-\frac{1}{2}i\omega_c t}$ に近づく．a が大きくなればなるほど，波束に強くきいてくる定常状態を表わす量子数は大きくなり，また (13.22) の A_n を最大とするような量子数 n_0 も大きくなる．$n\gg 1$ のとき，Stirling の公式を使って $\ln A_n$ を最大にする n_0 を見つけることができる；すなわち $\ln n$ およびそれ以下のオーダーの項を無視して

$$\ln A_n\approx n(\ln\xi_0-\tfrac{1}{2}\ln 2)-\tfrac{1}{2}n(\ln n-1)$$

$$n_0\approx\tfrac{1}{2}\xi_0{}^2=\frac{Ka^2}{2\hbar\omega_c} \qquad (13.23)$$

だから，エネルギー単位 $E_{n0}=(n_0+\frac{1}{2})\hbar\omega_c$ は，同じ振幅を持った古典的振動子のエネルギー $\frac{1}{2}Ka^2$ にほぼ等しく，このエネルギー準位付近のものが ψ に一番強くきいているわけである．

14□三次元の球対称なポテンシャル

三次元の波動方程式 (8.2) の解析的な解をみつけることは，それが三つの空間座標の各々に対する完全微分方程式に分離することができなければ一般に不可能である．ところで，((8.2) で $V=0$ とした) 自由粒子の波動方程式が分離できるような座標系は，11個あることがわかっている．[1] その最も重要なもののうちの一つは球座標で，それを使えば直角座標は次の関係で与えられる (第12図参照)．

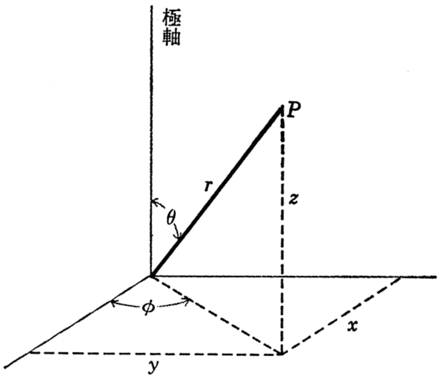
$$x=r\sin\theta\cos\phi$$

$$y=r\sin\theta\sin\phi$$

$$z=r\cos\theta$$

---

1) L. P. Eisenhart, *Phys. Rev.*, **45**, 428 (1934). また L. Pauling and E. B. Wilson, Jr., "Introduction to Quantum Mechanics." (McGraw-Hill, New York, 1935) の付録をも参照のこと



第12図　点 P の直交座標と球面座標との関係

もし，ポテンシャルエネルギーが球対称，すなわち $V(\mathbf{r})=V(r)$ がある原点から測った $\mathbf{r}$ の大きさ r だけの関数であるなら，波動方程式は常に球座標で分離することができる．いろいろの形をした球対称なポテンシャルを使って，物理的に興味のある多くの問題が厳密に，あるいは近似的に表わされる．この節では，この分離を実際行なって，その結果出てくる θ, ϕ の完全微分方程式を解き，次の二つの節で $V(r)$ が特別の形をしている場合の r に関する微分方程式を扱っていくことにする．

14-1　波動方程式の分離

ポテンシャルエネルギーが球対称のときの波動方程式 (8.2) は，球座標では次のように書き表わすことができる．

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]u$$
$$+V(r)u=Eu \qquad (14.1)$$

まずこれを r を含む部分と θ, ϕ を含む部分とに分けるために

$$u(r,\theta,\phi)=R(r)Y(\theta,\phi)$$

とおいて，これを (14.1) に代入し，両辺を u で割ると

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]$$

$$= -\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] \tag{14.2}$$

となる．(14.2) の左辺は r だけに，右辺は θ と ϕ だけに関係しているから，両辺ともある定数に等しくなければならない．この定数を λ とすると，(14.2) から動径部分の方程式として

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(r)]-\frac{\lambda}{r^2}\right\}R=0 \tag{14.3}$$

角部分の方程式として

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}+\lambda Y=0 \tag{14.4}$$

が得られる．

角部分の方程式 (14.4) は，$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ を代入して今と同じ手続きに従うと，さらに分離できて

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+\nu\Phi=0 \tag{14.5}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{\nu}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0 \tag{14.6}$$

となる．ϕ の方程式 (14.5) はすぐに解くことができ，その一般解は

$$\Phi(\phi)=Ae^{i\nu^{\frac{1}{2}}\phi}+Be^{-i\nu^{\frac{1}{2}}\phi}, \qquad \nu\neq 0$$

$$\Phi(\phi)=A+B\phi, \qquad \nu=0 \tag{14.7}$$

と書くことができる．ϕ の定義領域，つまり 0 から 2π までの間での Φ と $d\Phi/d\phi$ とは連続であるという §8 の要求から，ν はある整数の二乗になっていることが必要になる．したがって，(14.7) を

$$\Phi_m(\phi)=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}e^{im\phi} \tag{14.8}$$

で置き換えて，m が正負の整数または 0 の値をとることを許すとすれば，物理的に意味のある解はすべて含まれることになる．[1] $(2\pi)^{-1/2}$ という定数がかかっているのは，Φ を ϕ の領域で規格化して積分が 1 になるようにするためである．

14-2 Legendre の多項式

$V(r)$ の形がきまっていない以上，このようなやり方を進めて調べられるものといって

1) ごくまれには粒子の質量と混同するおそれがないでもないが，慣習に従って座標 ϕ に付随する量子数には記号 m を用いることにする．

は，たかだか θ の方程式を解くことが残されているだけである．ただし，$\nu=m^2$ である．このためには，θ の代りに $w=\cos\theta$ と変数を変換し，

$$\Theta(\theta)=P(w)$$

とおくのが便利である．その結果，(14.6) の方程式は

$$\frac{d}{dw}\left[(1-w^2)\frac{dP}{dw}\right]+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-w^2}\right)P=0 \tag{14.9}$$

となる．ただし θ の領域は 0 から π まで，したがって w の領域は 1 から -1 までとなる．方程式 (14.9) をとく手順は，多くの点で §13 に出てきた調和振動子の波動方程式を解くのと同じなので，ここでは細かいところまで述べないことにする．[1] (14.9) は二階の微分方程式だから二つの一次独立な解がある．λ が特定の値をとらない限り，これらの解はいずれも $w=\pm1$ で無限大となり，§8 によって物理的に許されないものとなる．しかし，l を正の整数または 0 として $\lambda=l(l+1)$ となっていれば，二つの解のうちの一つは $w=\pm1$ で有限である（他の一つはそうではないが）；この有限な解は $(1-w^2)^{\frac{1}{2}|m|}$ に w についての $l-|m|$ 次の多項式のかかった形をしており，$l-|m|$ の偶奇性を持っている．

$m=0$ のときの方程式 (14.9) の物理的に許された解は，**Legendre の多項式** *Legendre Polynomial* $P_l(w)$ とよばれている．Hermite の多項式のときとちょうど同じように，この Legendre 多項式の性質も母関数

$$T(w,s)=(1-2sw+s^2)^{-\frac{1}{2}}$$
$$=\sum_{l=0}^{\infty}P_l(w)s^l,\qquad s<1 \tag{14.10}$$

を使って調べることができる．この母関数を w と s とについて微分すると，Hermite の多項式に対する (13.11) に類似の関係式が導かれて

$$(1-w^2)P_l'=-lwP_l+lP_{l-1}$$
$$(l+1)P_{l+1}=(2l+1)wP_l-lP_{l-1} \tag{14.11}$$

となる．ただし $'$ は w についての微分を意味する．方程式 (14.11) から P_l だけを含んだ最低階の微分方程式をつくってみると，これは (14.9) で $\lambda=l(l+1)$，$m=0$ としたものになっていることが容易にわかる．

---

1) この方程式を完全に論じたものとしては，E. T. Whittaker and G. N. Watson, "A Course of Modern Analysis" 第4版，第15章 (Cambridge, London, 1935) をみよ．

m が必ずしも 0 でなくても，(14.9) は $\lambda=l(l+1)$，$|m|\leq l$ ならば物理的に許される解を持っている．この解は **Legendre の陪関数** *associated Legendre function* とよばれていて，Legendre の多項式を使って次のように表わすことができる．

$$P_l{}^m(w)=(1-w^2)^{\frac{1}{2}|m|}\frac{d^{|m|}}{dw^{|m|}}P_l(w) \tag{14.12}$$

この関係は，$P_l(w)$ の方程式を $|m|$ 回微分して得られるものに (14.12) を代入して確かめることができる．Legendre の陪関数の母関数は，(14.10) を w について $|m|$ 回微分して，$(1-w^2)^{\frac{1}{2}|m|}$ をかければ求められる．

$$\begin{aligned}T_m(w,s)&=\frac{(2|m|)!(1-w^2)^{\frac{1}{2}|m|}s^{|m|}}{2^{|m|}(|m|)!(1-2sw+s^2)^{|m|+\frac{1}{2}}}\\&=\sum_{l=|m|}^{\infty}P_l{}^m(w)s^l\end{aligned} \tag{14.13}$$

14-3　球面調和関数

完全な波動関数の角部分 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ は，方程式 (14.4) で $\lambda=l(l+1)$ としたときの解になっているが，この関数は**球面調和関数** *spherical harmonics* とよばれている．これは (14.8) の関数 $\Phi_m(\phi)$ と Legendre の陪関数に対する規格化定数 N_{lm} を使って次のように書けることは明らかである．

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=N_{lm}P_l{}^m(\cos\theta)\Phi_m(\phi) \tag{14.14}$$

§10 でエネルギー固有関数の規格直交性を証明したと同じようにして，異なった固有値 λ または l に対応する方程式 (14.4) の解が直交することを示すことができる．しかし，固有値 l は $(2l+1)$ 重に縮退している．というのは，l の一つの値と $+l$ から $-l$ までの間のすべての整数値をとる m の各々についての，互いに一次独立な解 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ が存在するからである．$\Phi_m(\phi)$ として (14.8) を選んでおけば，この縮退した固有関数も互いに直交するようになる．つまり積分

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}Y_{lm}^*(\theta,\phi)Y_{l'm'}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi=\int_{-1}^{1}\int_0^{2\pi}Y_{lm}^*Y_{l'm'}dwd\phi$$

は $l=l'$ かつ $m=m'$ でないときは 0 となる．興味あることとして，この場合の直交性はこの積分が零になるという結果を得るために必要な最小限度しか存在していないことを注意しておこう．つまり，$m\neq m'$ のときは l に無関係に ϕ についての積分の部分が 0 になり，θ すなわち w に関する部分は $l\neq l'$，$|m|=|m'|$ のときに限って 0 になり，

$m \neq m'$ のときは ϕ の積分によってすでに考えに入れられてしまっているのである。

積分

$$\int_{-1}^{1} P_l{}^m(w) P_{l'}{}^m(w) dw \tag{14.15}$$

はいろいろの仕方で計算される．たとえば，母関数 (14.13) を使って §13 で調べたと同じようにしてもよい．この結果は期待通り $l=l'$ でなければ 0 で，$l=l'$ のときは $[2/(2l+1)][(l+|m|)!/(l-|m|)!]$ となる；だから N_{lm} はこの値の平方根の逆数と取っておけばよい．さらに，それに大きさ 1 の任意の複素数の位相因子を含ませてもよい．結局，規格化された球面調和関数は

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \epsilon \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l{}^m(\cos\theta) e^{im\phi} \tag{14.16}$$

となる．たゞし $m>0$ に対しては $\epsilon=(-1)^m$ で $m \leq 0$ に対しては $\epsilon=1$ である．このうち，始めのいくつかを書きならべると次の通りになる

$$Y_{0,0} = \frac{1}{(4\pi)^{\frac{1}{2}}} \qquad Y_{1,0} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\theta$$

$$Y_{1,\pm1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta e^{\pm i\phi} \qquad Y_{2,0} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_{2,\pm1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi} \qquad Y_{2,\pm2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$$

14-4 パ リ テ ィ

ところで，§9 で導入したパリティという概念は，この節で調べられている型の三次元の問題にまで拡張することができる．位置座標 $\mathbf{r}$ を原点に対して反転して，$\mathbf{r}$ の代りに $-\mathbf{r}$ で置き換えるものとする．これは x を $-x$, y を $-y$, z を $-z$ で置き換えることに対応し，また別の言い方をすれば，θ を $\pi-\theta$, ϕ を $\phi+\pi$ で置き換え，r をそのままにしておくことに対応する．こうすることによって，波動方程式 (14.1) に起こる変化は，$u(r, \theta, \phi)$ が $u(r, \pi-\theta, \phi+\pi)$ になるだけで，他は明らかにもとのままである．そうすれば，§9 で調べたことからわかるように，固有関数が縮退していれば，その直交一次結合の各々にきまったパリティを持たすことができるし，また元々縮退がなければ一定のパリティを持っているはずである．

球対称のポテンシャルのエネルギーに対する準位は，$l>0$ の場合は，少なくとも

量子数mに関して縮退している．この場合，縮退した固有関数はすべて同一のパリティをもっていて，このパリティは，実はlのパリティに他ならないことを次に示すことにしよう．$\mathbf{r}$を原点を通って反転したとすると，解のrに関する部分$R(r)$はそのままで，ϕに関する部分$\Phi(\phi)$は(14.8)で表わされるから$|m|$のパリティを持つ．θに関する部分については，$P_l{}^m(w)$が偶関数$(1-w^2)^{\frac{1}{2}|m|}$と，wすなわち$\cos\theta$の符号の変化に関して$l-|m|$のパリティを持つwの多項式との積になっているから，これは$l-|m|$のパリティを持っている．結局，$Y_{lm}(\theta,\phi)$したがって$u(\mathbf{r})$はlのパリティを持つことになる．

14-5 角運動量

rに関する波動方程式(14.3)は，一次元の波動方程式(8.5)によく似た形に書き換えられる．すなわち$R(r)=\chi(r)/r$とおくと，このように変形された動径波動関数χに対する方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2}+\left[V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]\chi=E\chi \tag{14.17}$$

とかける．つまり動径方向の運動は

$$V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \tag{14.18}$$

というポテンシャルの中の，粒子の一次元運動と同じようになる．(14.18)に付け加えられた“ポテンシャルエネルギー”$l(l+1)\hbar^2/2mr^2$は，物理的には角運動量と関係していることが次のようにしてわかる．古典粒子が，その軌道平面に垂直で原点を通る軸の回りにLという角運動量を持っているとすれば，原点からの距離がrのときの角速度は$\omega=L/mr^2$となる．粒子を軌道からそらせないためには，内向の力

$$m\omega^2r=\frac{L^2}{mr^3}$$

が必要である．この“求心力”はポテンシャルエネルギーによって供給されるものであり，そのためには，動径運動に現われる$V(r)$に“遠心力のポテンシャルエネルギー”$L^2/2mr^2$が付け加えられねばならない．もし

$$L=[l(l+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar$$

とおけば，これは(14.18)で$V(r)$に付加された項と全く同じ形をしていることになる．

量子数 l と粒子の角運動量とを同一視するという上の物理的な議論を，定量的にするには，角運動量ベルトルの三つの成分に対応する演算子を見つけ出せばよい．古典論では，$\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$ であるから，量子論でも次のようにとることにしよう．

$$\begin{aligned}
L_x&=yp_z-zp_y=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\\
L_y&=zp_x-xp_z=-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\\
L_z&=xp_y-yp_x=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)
\end{aligned}\tag{14.19}$$

方程式 (14.19) は，球座標に変換することができて

$$\begin{aligned}
L_x&=i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\
L_y&=i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\
L_z&=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned}\tag{14.20}$$

となる．そうすれば，全角運動量の二乗を表わす演算子は，(14.20) から次のものなることがわかる．

$$\begin{aligned}
\mathbf{L}^2&=L_x{}^2+L_y{}^2+L_z{}^2\\
&=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]
\end{aligned}\tag{14.21}$$

方程式 (14.21) と (14.4) とを比べると，$Y_{lm}(\theta,\phi)$ は固有値 $l(l+1)\hbar^2$ を持つ $\mathbf{L}^2$ の固有関数になっている．

$$\mathbf{L}^2Y_{lm}(\theta,\phi)=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}(\theta,\phi)\tag{14.22}$$

同様にして，方程式 (14.8) の形と，(14.20) の最後の式とから $\Phi_m(\phi)$，したがって $Y_{lm}(\theta,\phi)$ が固有値 $m\hbar$ をもつ L_z の固有関数であることがわかる．

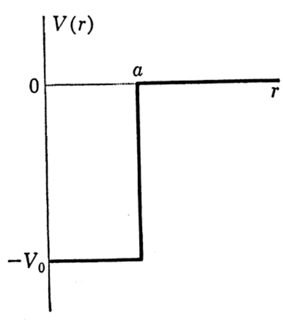
$$L_zY_{lm}(\theta,\phi)=m\hbar Y_{lm}(\theta,\phi)\tag{14.23}$$

こうして，波動方程式を球座標で分離した結果として，全角運動量と極軸方向の角運動量の成分との両方の固有関数になっている波動関数が得られる．方程式 (14.22) に出てくる量子数 l は，**方位量子数**または**軌道角運動量量子数** *azimutal or orbital angular momentum quantum number* とよばれる．(14.23) に出てくる量子数 m は**磁気量子数** *magnetic quantum number* とよばれる．というのはこの m は，角運動量

の磁場方向（z方向）の成分が問題になる Zeeman 効果（§39 参照）の理論で重要になるからである．しかし注意すべきことは，もしポテンシャルエネルギー $V(r)$ が球対称でないなら，一般に波動方程式はこういうふうにしては分離できず，角運動量の固有関数も得られないということである．これは角運動量は，中心力場（これは球対称ポテンシャルで表わされる）に対してのみ運動の恒量になり得る，という古典論の結果に対応するものである．しかし，古典論と量子論との間には極めて特徴的なちがいがあって，古典論では $\mathbf{L}$ の三つの成分は同時に正確に定めることができたのに，量子論では $Y_{lm}(\theta,\phi)$ は $l=0$ の場合を除いては，L_x, L_y の固有関数ではないのだから，同時に正確に定められるのは一般に L_z と $\mathbf{L}^2$ だけだということになっている．L_z を L_x, L_y から区別しているのは，z 方向が極軸の方向に選ばれていることによるものであるが，もちろんこの方向の選び方は元来全く任意で，これは前期量子論でも外力の無いときに空間の量子化の方向を任意にとってよいのに対応している．

15 三次元の角井戸型のポテンシャル

こゝで，特定の形のポテンシャルエネルギー $V(r)$ を選び，ある角運動量の量子数 l を決めて，動径部分の波動方程式（14.3）を解き，それらに対応する状態のエネルギー準位を求める次の段取りになるわけである．最初の例として，有限な深さを持った角井戸型のポテンシャルを考えることにしよう．つまり $r<a$ では $V(r)=-V_0$，$r>a$ では $V(r)=0$，ただし $V_0>0$ とする（第13図をみよ）．この円筒型の領域内では周囲よりポテンシャルが低くなっているわけだが，§9 で考えた一次元の場合と同じようにこの領域は粒子を引きつける役目をするのである．



第13図　深さ半径の球対称の角井戸型ポテンシャル

15-1　角運動量 0 の場合の解

$l=0$ のときは，（14.3）よりも（14.17）の形の波動方程式の方が解きやすい．すなわち，

この場合 $R(r)=\chi(r)/r$ とおくと．χ についての波動方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2}-V_0\chi=E\chi, \qquad r<a$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2}=E\chi, \qquad r>a \tag{15.1}$$

となる．(15.1) を解くことは，次の三点を除いては，§9 で述べた〔一次元の〕階段ポテンシャルの場合と同じである：この三点とは，第一に今の問題ではエネルギーの基準があらゆる場所で V_0 だけ低くとられていること；第二に x の領域は $-\infty$ から $+\infty$ までであったが，r の領域は 0 から $+\infty$ までであること；第三に $x=-\infty$ で波動関数が無限大にならないという境界条件は，今度 $r=0$ での同じ条件に置き換えられることである．

§9 での議論から明らかなように，方程式 (15.1) の解は

$$\chi(r)=A\sin\alpha r+B\cos\alpha r, \qquad \alpha=\left[\frac{2m(V_0-|E|)}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}, \qquad r<a,$$
$$\chi(r)=Ce^{-\beta r}, \qquad \beta=\left(\frac{2m|E|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}. \qquad r>a \tag{15.2}$$

ただし，今の場合，興味のあるのは実は束縛状態すなわち $E<0$ のときのエネルギー準位である．ところで $r=0$ で $R(r)$ が有限であるという要請から，(15.2) の初めの式で $B=0$ とおくことが必要になる．つまり，この解は，一次元の問題のパリティが奇の解の形をしているわけである．エネルギー準位を得るために，$r=a$ で $(1/\chi)(d\chi/dr)$ が内側と外側とで等しいと置く〔これは $(1/R)(dR/dr)$ を $r=a$ で連続にするのと同じことである〕．その結果，エネルギー準位は次の方程式を解くことによって与えられることになる．

$$\alpha\cot\alpha a=-\beta \tag{15.3}$$

これは (9.6) と同じものである．これを解いてエネルギー準位を求めると，第 9 図を使った議論によって，$V_0a^2>\pi^2\hbar^2/8m$ となってなければエネルギー準位は存在しない；$\pi^2\hbar^2/8m<V_0a^2\leqq 9\pi^2\hbar^2/8m$ なら束縛状態が一つある．以下 §9 と同じである．

15-2 任意の l に対する内部の解

l が 0 でない値をとるときには，χ についての方程式を解くよりも，元の $R(r)$ についての動径部分の方程式 (14.3) を解く方が便利である．α を (15.2) で定義されたもの

として，$\rho=\alpha r$ とおくと，$r<a$ に対する波動方程式は

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0 \tag{15.4}$$

となる．(15.4) の方程式と，Bessel の方程式とは非常によく似た形をしていることから，$R(r)$ は Bessel 関数によって表わすことができそうに見える．事実そうなっていて，今 $\rho=0$ で正則な“球面 Bessel 関数” $j_l(\rho)$ を

$$j_l(\rho)=\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{\frac{1}{2}}J_{l+\frac{1}{2}}(\rho) \tag{15.5}$$

と定義すれば,[1] この $j_l(\rho)$ が方程式 (15.4) を満たすということは容易に証明される．ただし，この J は普通の Bessel 関数の半奇数次のものである．次式で定義される“球面 Neumann 関数” n_l についても，全く同様である．

$$n_l(\rho)=(-1)^{l+1}\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{\frac{1}{2}}J_{-l-\frac{1}{2}}(\rho)$$

l を正負の整数または 0 とした場合，$J_{l+\frac{1}{2}}(\rho)$ は $\sin\rho$ および $\cos\rho$ と $\rho^{-1/2}$ の奇数次の多項式との積の和として表わされることがわかっている．[2] 特に初めの三つについて j と n とを書き表わすと

$$j_0(\rho)=\frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad n_0(\rho)=-\frac{\cos\rho}{\rho}$$

$$j_1(\rho)=\frac{\sin\rho}{\rho^2}-\frac{\cos\rho}{\rho}, \qquad n_1(\rho)=-\frac{\cos\rho}{\rho^2}-\frac{\sin\rho}{\rho}$$

$$j_2(\rho)=\left(\frac{3}{\rho^3}-\frac{1}{\rho}\right)\sin\rho-\frac{3}{\rho^2}\cos\rho, \qquad n_2(\rho)=-\left(\frac{3}{\rho^3}-\frac{1}{\rho}\right)\cos\rho-\frac{3}{\rho^2}\sin\rho \tag{15.6}$$

ρ が小さいときに，主にきいてくる項は,[3]

$$j_l(\rho)\xrightarrow[\rho\to 0]{}\frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \qquad n_l(\rho)\xrightarrow[\rho\to 0]{}-\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}$$

$$(2l+1)!!\equiv 1\cdot 3\cdot 5\cdots(2l+1) \tag{15.7}$$

---

1) この定義および j_l および n_l の諸性質は P. M. Morse and K. U. Ingard, "Theoretical Acoustics" (McGraw-Hill, New York, 1968) pp. 337–338 から採用した．

2) G. N. Watson, "Theory of Bessel Functions" (Macmillan, New York, 1945). 第2版，p. 52

3) (15. 7) は ρ^2 がそれぞれ $4l+6$ および 2 よりいくらか小いとき便利な近似になっている (G. N. Watson, 上掲書, pp. 44).

また，ρ についての漸近展開での主な項は[1]

$$j_l(\rho) \xrightarrow[\rho\to\infty]{} \frac{1}{\rho}\cos\left[\rho-\tfrac{1}{2}(l+1)\pi\right]$$
$$n_l(\rho) \xrightarrow[\rho\to\infty]{} \frac{1}{\rho}\sin\left[\rho-\tfrac{1}{2}(l+1)\pi\right] \tag{15.8}$$

となる．j と n とのいくつか性質を列記しておく．

$$\int j_0^2(\rho)\rho^2 d\rho=\tfrac{1}{2}\rho^3[j_0^2(\rho)+n_0(\rho)j_1(\rho)]$$

$$\int n_0^2(\rho)\rho^2 d\rho=\tfrac{1}{2}\rho^3[n_0^2(\rho)-j_0(\rho)n_1(\rho)]$$

$$n_{l-1}(\rho)j_l(\rho)-n_l(\rho)j_{l-1}(\rho)=\frac{1}{\rho^2},\qquad l>0 \tag{15.9}$$

$$j_l(\rho)\frac{d}{d\rho}n_l(\rho)-n_l(\rho)\frac{d}{d\rho}j_l(\rho)=\frac{1}{\rho^2}$$

また，次にあげるものは j についても n についても成立する性質である．

$$j_{l-1}(\rho)+j_{l+1}(\rho)=\frac{2l+1}{\rho}j_l(\rho),\qquad l>0$$

$$\frac{d}{d\rho}j_l(\rho)=\frac{1}{2l+1}[lj_{l-1}(\rho)-(l+1)j_{l+1}(\rho)]$$
$$=j_{l-1}(\rho)-\frac{l+1}{\rho}j_l(\rho)$$

$$\frac{d}{d\rho}[\rho^{l+1}j_l(\rho)]=\rho^{l+1}j_{l-1}(\rho),\qquad l>0 \tag{15.10}$$

$$\frac{d}{d\rho}[\rho^{-l}j_l(\rho)]=-\rho^{-l}j_{l+1}(\rho)$$

$$\int j_1(\rho)d\rho=-j_0(\rho)$$

$$\int j_0(\rho)\rho^2 d\rho=\rho^2 j_1(\rho)$$

$$\int j_l^2(\rho)\rho^2 d\rho=\tfrac{1}{2}\rho^3[j_l^2(\rho)-j_{l-1}(\rho)j_{l+1}(\rho)],\qquad l>0$$

---

1) 方程式 (15.8) は ρ が $\frac{1}{2}l(l+1)$ より大きい限りでは，便利な近似になっている，(Watson, 前掲書 p. 199 参照)；しかし j_l および n_l の（位相は一応考えないとして）絶対値は，ρ が l に比べて大きいといえる限りでは (15.8) で十分よい近似値が与えられる．またこの ρ の値は j_l の絶対値を最大にする ρ の近似値になっている．

$R(r)$ は $r=0$ で有限でなければならないから，$r<a$ での求める解は

$$R(r)=Aj_l(\alpha r) \tag{15.11}$$

15-3 任意の l に対する外部の解

$r>a$ での波動方程式は，(15.2) で与えられる β を使って今度は $\rho=i\beta r$ と定義し直すと，やはり (15.4) の形に書ける．ρ の領域は，今度は $\rho=0$ にわたっていないのだから，n_l が解の中に現われてきてはならないとする理由は少しもないわけである．n_l と j_l との一次結合をどのように選ぶべきかは，r が大きいところでその漸近形が指数関数的に減少しなければならない，ということから決定されるはずである．そこで考えられるのは

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\rho)&=j_l(\rho)+in_l(\rho)\\ h_l^{(2)}(\rho)&=j_l(\rho)-in_l(\rho) \end{aligned} \tag{15.12}$$

で定義される **Hankel の球関数** *spherical Hankel functions* をとってみることである．これは，(15.8) により次の漸近形を持っている．

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\rho) &\xrightarrow[\rho\to\infty]{} \frac{1}{\rho}e^{i[\rho-\frac{1}{2}(l+1)\pi]}\\ h_l^{(2)}(\rho) &\xrightarrow[\rho\to\infty]{} \frac{1}{\rho}e^{-i[\rho-\frac{1}{2}(l+1)\pi]} \end{aligned} \tag{15.13}$$

方程式 (15.13) で与えられているのは，漸近展開での主な項であるが，この展開では冪指数が上のものと逆符号を持つようなものは含まれてこないことは証明することができる．

そうすると，$r>a$ での求めている解は次のものになる．

$$R(r)=Bh_l^{(1)}(i\beta r)=B[j_l(i\beta r)+in_l(i\beta r)] \tag{15.14}$$

これらの関数のうち，始めの三つを書き出してみると次のようになる．

$$\begin{aligned} h_0^{(1)}(i\beta r)&=-\frac{1}{\beta r}e^{-\beta r}\\ h_1^{(1)}(i\beta r)&=i\left(\frac{1}{\beta r}+\frac{1}{\beta^2r^2}\right)e^{-\beta r}\\ h_2^{(1)}(i\beta r)&=\left(\frac{1}{\beta r}+\frac{3}{\beta^2r^2}+\frac{3}{\beta^3r^3}\right)e^{-\beta r} \end{aligned} \tag{15.15}$$

15-4　エネルギー準位

エネルギー準位は，$r=a$ で $(1/R)(dR/dr)$ が連続という要求から求められる．内側の解 (15.11) と外側の解 (15.15) で，$l=0$ としたものにこの条件をあてはめると (15.3) の方程式が得られる．§9 と同じように，これを $\xi=\alpha a,\ \eta=\beta a$ とおいて書き換えると

$$\xi\cot\xi=-\eta,\qquad \xi^2+\eta^2=\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \tag{15.16}$$

となる．また，今と同じ条件を $l=1$ の解にあてはめると，(15.6) と (15.15) とから

$$\frac{\cot\xi}{\xi}-\frac{1}{\xi^2}=\frac{1}{\eta}+\frac{1}{\eta^2},\qquad \xi^2+\eta^2=\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \tag{15.17}$$

となり，これは §9 で (15.16) を解いた際に示しておいた方法によって，数値的にまたは，グラフを使って解くことができる．一般に，いろいろな値の l に対して，(15.16) や (15.17) のような方程式を解いて出てくる固有値の間には縮退はない．

V_0a^2 がいろいろ変っていくにつれて，(15.17) を満たすエネルギー準位がいくつ存在するかは数値的な取り扱いをしないでも容易に知ることができる．つまり，η が 0，言い換えれば $\cot\xi$ が無限大になるごとに，新しい準位が一つあらわれる．このことが起こるのは $\xi=\pi, 2\pi, \cdots$ のところであるから，したがって

$$V_0a^2\leqq\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}$$

ならば，$l=1$ のエネルギー準位は，存在せず，また $\pi^2\hbar^2/2m<V_0a^2\leqq 2\pi^2\hbar^2/m$ ならば $l=1$ の束縛状態が一つあることになり，以下同様である．

束縛状態が一つ存在するための V_0a^2 の最小値は，$l=1$ のときの方が $l=0$ のときよりも大きい；物理的な立場からは，これはもっともなことである．というのは，動径部分の波動方程式における l の項を，斥力として働く“遠心力”にあたる付加的なポテンシャルエネルギーだとする §14 の解釈にしたがえば，角運動量を持った粒子を拘束しておくには，角運動量のないものに対してよりもより強い引力が必要になると考えられるからである．実際，すぐにわかるように，軌道角運動量の量子数 l を持つ粒子を拘束しておくのに要する最小の井戸型のポテンシャルの“強さ” V_0a^2 は，l が増えると共に単調に増えていくのである．[1]

---

1)　l が特別の値 $[(1/R)(dR/dr)]_{r=a}=-(l+1)/a$ をとるときは，エネルギーが 0 の束縛状態が現われる；$l>0$ のときは，これは $j_{l-1}(\xi)=0$ という条件に等しい．ただし，この場合 $\xi=(2mV_0a^2/\hbar^2)^{1/2}$ である．

16□水　素　原　子

$+Ze$ の荷電を持つ原子核と $-e$ の荷電を持つ電子との間に働いている Coulomb の引力は，$V(r)=-Ze^2/r$ というポテンシャルエネルギーで表わされるが，この場合も解析的に解くことができる波動方程式の今一つの例になっている．この問題は直接物理的に興味がある．というのは，相対論的な影響を無視すれば（第XIII章参照），このようにして計算されたエネルギーの固有値は，水素原子（$Z=1$）や，+1価のヘリウム・イオン（$Z=2$）等について観測されたエネルギー準位と一致しているのである．

16-1　換　算　質　量

§6 で導いた Schrödinger の波動方程式は，外力の場の中の一個の粒子の運動を記述するものであった．ところが，今問題になっているのは，二つの粒子（原子核と電子）の間に互の間の距離にだけ関係する引力が働いているときの運動なのである．この際，用いるべき二個の粒子に対する波動方程式の形は，§6 で一次元から三次元に波動方程式を拡張したときのことを思い返せば見当をつけることができよう．§6 での拡張では，波動関数を x だけに関係するとする代りに，x，y，z の三つの直交座標の関数であるとし，古典的なエネルギーの表式に従ってこの新しい座標に対応する運動量を導入する手続きをとった．

それと同じように，今度は三つの直交座標から六つの直交座標に拡張することにすれば，ただちに質量 m_1, m_2 の二個の粒子に対する次の Schrödinger の波動方程式に導かれる：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x_1,y_1,z_1,x_2,y_2,z_2,t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_1{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_1{}^2}\right)\right.$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m_2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_2{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_2{}^2}\right)$$
$$\left.+V(x_1,y_1,z_1,x_2,y_2,z_2,t)\right]\psi(x_1,y_1,z_1,x_2,y_2,z_2,t) \tag{16.1}$$

ただし，このポテンシャルエネルギーは六つの直交座標のすべてと，時間とにどんなふうに関係してもかまわないと仮定しておく．ところで今，ポテンシャルエネルギーが，

二つの粒子の相対座標にだけに関係するものとすれば，$V=V(x_1-x_2, y_1-y_2, z_1-z_2)$ となって波動方程式は簡単になるが，この簡単化は重要な意味をもっている．つまり，相対座標 x, y, z と重心座標 X, Y, Z とを次式で定義する．

$$
\begin{aligned}
&x=x_1-x_2, \qquad y=y_1-y_2, \qquad z=z_1-z_2 \\
&MX=m_1x_1+m_2x_2, \qquad MY=m_1y_1+m_2y_2, \qquad MZ=m_1z_1+m_2z_2
\end{aligned}
\tag{16.2}
$$

ただし，$M=m_1+m_2$ は系の全質量である．新しい座標を使えば，(16.1) の方程式は次のように書き直せる．

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\Bigg[&-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) \\
&-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x, y, z)\Bigg]\psi
\end{aligned}
\tag{16.3}
$$

ただし，この

$$\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2} \tag{16.4}$$

は**換算質量** *reduced mass* とよばれる．

ところで，波動方程式 (16.3) は二段に分離してゆくことができる．まず，§8 でしたように時間的に変化する部分を分けてしまうことができる；次に，相対座標のみの関数と質量中心の座標のみの関数の積の形に分離することができるのである．この手続きはすぐにしかも簡単にできて，その結果は

$$
\begin{aligned}
&\psi(x, y, z, X, Y, Z, t)=u(x, y, z)U(X, Y, Z)e^{-i(E+E')t/\hbar} \\
&\quad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2u+Vu=Eu \\
&\qquad -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2U=E'U
\end{aligned}
\tag{16.5}
$$

となる．第二式，第三式に出てくる微分演算子 ∇^2 は，それぞれ相対座標，重心座標に関する微分を意味するものである．(16.5) の第二式は，二つの粒子の相対運動を表わし，ちょうどポテンシャルエネルギー V の外力中での換算質量 μ を質量とする一個の粒子の運動方程式と同じものである．第三式は，二個の粒子からなる系の重心は質量 M の自由粒子のように運動することを示している．

水素原子の問題では，興味があるのは相対運動に伴うエネルギー準位である．原

子核は電子よりもはるかに質量が大きいから，この場合の換算質量 μ は電子の質量よりほんの僅か小さくなっているに過ぎない．

16-2 漸　近　形

相対運動を球座標で分離することは，§14 と同様にして行なう．角運動量の量子数 l に対応する動径部分の方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{Ze^2}{r}R+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}R=ER \tag{16.6}$$

となる．ただし，束縛状態に対応して $E<0$ とする．[1] §13で，調和振動子の方程式を扱った多項式による方法に従うことにして，まず，無次元の独立変数 $\rho=\alpha r$ を導入し，(16.6) の方程式をデイメンジョンのない形に書き直しておく．ただし，(13.1) の方程式では r が大きいところで主にきいてくる項は，ポテンシャルエネルギーの項 $\frac{1}{2}Kx^2$ であったのに対し，方程式 (16.6) の r が大きいところでの主な項は，固有値 E の項になっている．だから，E の項が，ある唯の数に固定されるように α を定めると，r が大きいところでの解の漸近的な様子は固有値に無関係になる．今方程式 (16.6) を

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right)+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R=0 \tag{16.7}$$

と書き換えることにする．この場合は，固有値の項として，1/4 という数が特に選ばれている．この選び方は任意であるが，こうしておくと後の議論に便利なのである．(16.6) と (16.7) とを比べてわかるように

$$\alpha^2=\frac{8\mu|E|}{\hbar^2},\qquad \lambda=\frac{2\mu Ze^2}{\alpha\hbar^2}=\frac{Ze^2}{\hbar}\left(\frac{\mu}{2|E|}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{16.8}$$

調和振動子のときと同様に，まず $\rho\to\infty$ の漸近的な領域での $R(\rho)$ に主にきいてくる項の様子を調べることにしよう．ρ が十分大きいところできいてくる項（R のオーダーで）に関する限り $R(\rho)=\rho^n e^{\pm\frac{1}{2}\rho}$ は明らかに (16.7) を満たす．この n は有限ならばどんな値でもよい．このことから，(16.7) の正確な解は $F(\rho)$ を ρ の有限次の多項式として

$$R(\rho)=F(\rho)e^{-\frac{1}{2}\rho} \tag{16.9}$$

の形をしているという見当がつけられる．(16.9) を (16.7) の方程式に代入すると，

---

1) E. Schrödinger, *Ann. Physik*, **79**, 361 (1926)

$F(\rho)$ に関する方程式として

$$F''+\left(\frac{2}{\rho}-1\right)F'+\left[\frac{\lambda-1}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]F=0 \tag{16.10}$$

が得られる．ここで $'$ は ρ に関する微分を表わす．

16-3　エネルギー準位

さて，(16.10) の解 F として次の形のものを求めることにしよう．

$$F(\rho)=\rho^s(a_0+a_1\rho+a_2\rho^2+\cdots)\equiv\rho^s L(\rho), \qquad a_0\neq 0, \qquad s\geq 0 \tag{16.11}$$

これは，$\rho=0$ で必ず有限になっている．(16.11) を (16.10) の方程式に入れると，L の方程式は

$$\rho^2L''+\rho[2(s+1)-\rho]L'+[\rho(\lambda-s-1)+s(s+1)-l(l+1)]L=0$$

この方程式で $\rho=0$ とおくと，(16.11) で考えられている L の形からして，$s(s+1)-l(l+1)=0$ が導かれる．s についてのこの二次方程式は二つの根；$s=l$，$s=-(l+1)$ を持っている．$\rho=0$ で $R(\rho)$ が有限という境界条件があるから，$s=l$ ととることが必要である．こうすると，L の方程式は

$$\rho L''+[2(l+1)-\rho]L'+(\lambda-l-1)L=0 \tag{16.12}$$

となる．

方程式 (16.12) は，L を (16.11) で示されている形の冪級数で置き換えて解くことができる．すぐわかるように，級数の次々の各項の係数の間には次の漸化関係式がある．

$$a_{\nu+1}=\frac{\nu+l+1-\lambda}{(\nu+1)(\nu+2l+2)}a_\nu \tag{16.13}$$

もし級数が有限のところで切れないとすれば，その主な漸近的な様子は高次の項の係数の形から推定することができる：

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_\nu}\xrightarrow[\nu\to\infty]{}\frac{1}{\nu}$$

この比は，有限な任意の n に対する級数 $\rho^n e^\rho$ の係数の比と同じである．ところが，L の漸近的な様子がこのようなものであることは，ρ の大きいところでの R についての境界条件と抵触することが，(16.9) および (16.11) からわかる．

したがって，級数 L は有限項で終わらねばならない．L の中で ρ の最高次のも

のを $\rho^{n'}(n'\geqq 0)$ とすれば，λ を次のような正整数 n に等しくとらねばならない[1]．

$$\lambda=n=n'+l+1 \tag{16.14}$$

n' は**動径量子数** *radial quantum number*，n は**全量子数** *total quantum number* とよばれている．n' も l も正の整数および0の値をとり得るから，n は 1, 2, … という値をとることになる．すると，(16.8) により，エネルギー固有値は

$$E_n=-|E_n|=-\frac{\mu Z^2e^4}{2\hbar^2n^2} \tag{16.15}$$

となり，これは古典量子論とも，実験とも一致する，§15 で考えた井戸型のポテンシャルでの問題とちがうのは，Coulomb 場の問題では任意の有限な Z に対して $-\mu Z^2e^4/2\hbar^2$ から0に到る間に無数の離散的なエネルギー準位が現われるという点である．これは，r の大きいところで Coulomb の場のポテンシャルの絶対値の減り方がゆっくりしていることによるものである．

16-4 Laguerre の多項式

$\lambda=n$ としたときの方程式 (16.12) の解のうち，物理的に許されるものは **Laguerre の多項式** *Laguerre polynomials* $L_q(\rho)$ を使って表わすことができる．この多項式は，次の母関数を使って定義される．

$$\begin{aligned} U(\rho,s)&=\frac{e^{-\rho s/(1-s)}}{1-s} \\ &=\sum_{q=0}^{\infty}\frac{L_q(\rho)}{q!}s^q, \qquad s<1 \end{aligned} \tag{16.16}$$

この母関数を ρ および s に関して微分すれば，Hermite の多項式における (13.11)，Legrendre の多項式における (14.11) に類似の次の関係式が得られる．

$$\begin{aligned} &L_q'-qL'_{q-1}=-qL_{q-1} \\ &L_{q+1}=(2q+1-\rho)L_q-q^2L_{q-1} \end{aligned} \tag{16.17}$$

方程式 (16.17) からつくられる L_q のみを含む微分方程式のうち最低階のものは，すぐにわかるように

---

1) このように，λ に許された値が整数の倍数にならずちょうど整数にとれるという結果が導かれたのは，デイメンジョンのない動径部分の波動方程式 (16.7) で固有値の項に1/4を選んだことによるものである．

$$\rho L''_q+(1-\rho)L_q'+qL_q=0 \tag{16.18}$$

となる．方程式（16.18）は，（16.12）の方程式に似た形をしてはいるが全く同じではない．そこで今

$$L_q{}^p(\rho)=\frac{d^p}{d\rho^p}L_q(\rho) \tag{16.19}$$

で定義された **Laguerre の随伴多項式** *associated Laguerre polynomial* を考えると，方程式（16.18）を p 回微分して，$L_q{}^p(\rho)$ は次の式を満たすことがわかる．

$$\rho L_q{}^{p''}+(p+1-\rho)L_q{}^{p'}+(q-p)L_q{}^p=0 \tag{16.20}$$

（16.12）で $\lambda=n$ とおいたものと，この（16.20）とを比べれば，求める多項式の解は Laguerre の随伴多項式 $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ に他ならないことがわかる． $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ の次数は $(n+l)-(2l+1)=n-l-1$ で（16.14）と一致している．

（16.16）を ρ に関して p 回微分すると，Laguerre の随伴多項式の母関数が得られて

$$U_p(\rho,s)=\frac{(-s)^p e^{-\rho s/(1-s)}}{(1-s)^{p+1}}=\sum_{q=p}^{\infty}\frac{L_q{}^p(\rho)}{q!}s^q \tag{16.21}$$

となる．$L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ の具体的な表式は

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho)=\sum_{k=0}^{n-l-1}(-1)^{k+2l+1}\frac{[(n+l)!]^2\rho^k}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!k!} \tag{16.22}$$

となる．この関係は，$n+l=q$，$2l+1=p$ としてこれを（16.21）に代入し，二重和の順序を変えれば確かめることができる．

16-5 水素原子の波動関数

波動関数の動径部分は $e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ の形をしている．規格化定数を定める積分は，母関数を使って計算できて

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{2l}[L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2\rho^2 d\rho=\frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \tag{16.23}$$

こうして，水素原子の規格化されたエネルギーの固有関数は

$$u_{nlm}(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$R_{nl}(r)=-\left\{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \tag{16.24}$$

$$a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2},\qquad \rho=\frac{2Z}{na_0}r$$

となる．ただし，$Y_{lm}(\theta,\phi)$ は（14.16）で与えられる規格化された球面調和関数であり，a_0 は前期量子論での水素原子（$Z=1$）における Bohr の第一の（円）軌道の半径である．これらを使えば，エネルギー準位（16.15）は

$$E_n=-\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2}$$

とも書くことができる．

動径波動関数の始めの三つは，（16.22）と（16.24）により

$$R_{10}(r)=\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}2e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{20}(r)=\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{21}(r)=\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{Zr}{a_0\sqrt{3}}e^{-Zr/2a_0}$$

となる．Pauling および Wilson の教科書には，この種の関数の完全系が，もっと多く，かつあるものはグラフとともに与えられている[1]．

$r=0$ では $dR_{n0}/dr\neq0$ かつ Y_{00} は $\theta,\ \phi$ と無関係ということから，$l=0$ の固有関数は $r=0$ で不連続な勾配を持っていることは注目すべき興味ある点である．これは $r=0$ でポテンシャルエネルギーが負の無限大になる結果である．それは，完全剛体の壁に対する境界条件を出すのに §8 で行なったのと同じ極限を考えるやり方で示すことができる．

16-6　縮　　　退

エネルギー固有値（16.15）は n にだけ関係しているから，l および m の両方について縮退している．つまり，n のそれぞれの値に対して l は 0 から $n-1$ まで変わることができ，さらにこれらの l の一つ一つについて m は $-l$ から $+l$ まで変わることができる．結局，エネルギー準位 E_n に縮退している状態の数は全部で

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=2\frac{n(n-1)}{2}+n=n^2$$

となる．

1)　Pauling and Wilson，前掲書第21章．

§14 で調べたところからわかるように，mに関する縮退は，Vがある点からの直距離rにだけ関係しているすべての中心力場に特徴的なものなのである．しかし，lに関する縮退は，Coulomb 場を他の大部分の中心力場から区別する特徴になっている[1]．ある種の問題，たとえばアルカリ原子の価電子の運動の問題等では，電子のポテンシャルエネルギーはやはり中心に対して対称ではあるが，ただ近似的にだけ Coulomb 場の形をしているのであり，このときは全量子数nは同じでlだけが異なるn個のエネルギー準位は一致しなくなって，水素原子ではn番目にあたる準位はn個の別々の準位にわかれる．また，ある外力の場（たとえば磁場）が働いて今までの球対称性がこわれると，$(2l+1)$ 重のmの縮退もなくなって，水素型の原子でのn番目にあたる準位は n^2 個の別々の準位にわかれる．

縮退したエネルギーの固有値があるということは，この固有値に対応する固有関数の一次結合が，それと同じエネルギーを持つ波動方程式の解になっているということを意味している．mについての縮退の場合に，球面調和関数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ のそのような一次結合を求めてみると，それは極軸を新しく選んだものに相当していることを示すことができる．同様な意味で，nが同じでlが違うという水素型原子の縮退した固有関数の一次結合は，何らかの座標の新しいえらび方に対応しているということは当然期待されるところである．これは事実で，水素原子の波動方程式は放物線座標でも分離できるのである．一般に，波動方程式が二つ以上の方法で（すなわち異なった座標系かあるいは同じ座標系でも違った方向にとって）解けるときは常に縮退が起こる．なぜなら，縮退がなければ異なる座標系で得られた波動関数は，それにかかる定数を除いては同じものであるはずだが，これは普通の場合には不可能だからである．一般の中心力場にあっては $l=0$ のときにこの例外が起こり，波動関数は球対称で極軸をどういう方向にとっても同じ形をしている．したがって縮退は存在しない．また水素原子の問題では $n=1$ のときにも同じ例外が起こり，波動関数を球座標で分離したときも，放物線座標で分離したときも得られる解は同じになっている．

16-7 放物線座標での分離

放物線座標 ξ,η,ϕ は，球座標を使うと次の関係で与えられる．

1) この種の縮退を生じる Coulomb 場の特殊な対称性については，§30 で議論する．

$$\begin{aligned}\xi&=r-z=r(1-\cos\theta)\\ \eta&=r+z=r(1+\cos\theta)\\ \phi&=\phi\end{aligned} \tag{16.25}$$

ξ が定数という曲面は，原点を共通の焦点として z の方向，すなわち $\theta=0$ の方向に開いた放物線を z-軸すなわち極軸を中心として回転してできる回転放物面の集まりである．また η が定数という曲面も同様に，z の負の方向，すなわち $\theta=\pi$ の方向に開いた，焦点を共有する回転放物面の集りである．ϕ が定数という曲面は，極座標のときに同じ極軸を通る平面を表わしている．

放物線座標での水素原子の波動方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial u}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial u}{\partial\eta}\right)\right]+\frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2 u}{\partial\phi^2}\right\}$$
$$-\frac{2Ze^2}{\xi+\eta}u=Eu, \qquad E<0 \tag{16.26}$$

となる．この方程式の変数分離を行なうには

$$u(\xi,\eta,\phi)=f(\xi)g(\eta)\Phi(\phi)$$

とおけばよい．すなわち，これを（16.26）に代入して u で割ると，ϕ についての方程式がすぐ分離できる：

$$\frac{4\xi\eta}{\xi+\eta}\left[\frac{1}{f}\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{\partial f}{\partial\xi}\right)+\frac{1}{g}\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{dg}{d\eta}\right)\right]+\frac{4\mu Ze^2\xi\eta}{\hbar^2(\xi+\eta)}$$
$$-\frac{2\mu|E|\xi\eta}{\hbar^2}=-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} \tag{16.27}$$

左辺は ξ と η にだけ，右辺は ϕ にだけ関係するから，両辺ともある定数に等しいはずで，この定数を m^2 としよう．そうすれば，§14 での議論を繰り返して，ϕ についての規格化された解としては，（14.8）と同じ

$$\Phi_m(\phi)=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}e^{im\phi}, \qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{16.28}$$

が得られる．

方程式（16.27）の残りの部分も，ξ および η だけの部分に分離できる：

$$\frac{1}{f}\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df}{d\xi}\right)-\frac{m^2}{4\xi}-\frac{\mu|E|}{2\hbar^2}\xi+\frac{\mu Ze^2}{\hbar^2}$$

---

1) E. Schrödinger, *Ann. Physik*, **80**, 437 (1926) ; P. S. Epstein, *Phys. Rev.*, **28**, 695 (1926) ; I. Waller, *Z. Physik*, **38**, 635 (1926).

$$=-\left[\frac{1}{g}\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{dg}{d\eta}\right)-\frac{m^2}{4\eta}-\frac{\mu|E|}{2\hbar^2}\eta\right)=\nu \tag{16.29}$$

この分離定数νは，境界条件から定められるべきものである．こうして，fおよびgに対する方程式は，それぞれ

$$\begin{aligned}&\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df}{d\xi}\right)-\left(\frac{m^2}{4\xi}+\frac{\mu|E|\xi}{2\hbar^2}-\frac{\mu Ze^2}{\hbar^2}+\nu\right)f=0\\&\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{dg}{d\eta}\right)-\left(\frac{m^2}{4\eta}+\frac{\mu|E|\eta}{2\hbar^2}-\nu\right)g=0\end{aligned} \tag{16.30}$$

となる．この二つの方程式は同じ形をしていて，ただ定数項が違うだけであるから，そのうちの一つを解けば十分である．

16-8 エネルギー準位

(16.30) の始めの式は，(16.6) に用いたのと同じ方法で解ける．$\zeta=\alpha\xi$ を代入すると，この式はデイメンジョンのない形

$$\frac{1}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}\left(\zeta\frac{df}{d\zeta}\right)+\left(\frac{\lambda_1}{\zeta}-\frac{1}{4}-\frac{m^2}{4\zeta^2}\right)f=0 \tag{16.31}$$

となる．このとき，パラメーター α, λ_1 は

$$\alpha^2=\frac{2\mu|E|}{\hbar^2},\qquad \lambda_1=\frac{1}{\alpha}\left(\frac{\mu Ze^2}{\hbar^2}-\nu\right) \tag{16.32}$$

ととってある．(16.30) の後の式もまた，これと同じαを使って $\zeta=\alpha\eta$ とおき，λ_1 の代わりに

$$\lambda_2=\frac{\nu}{\alpha} \tag{16.33}$$

ととると，(16.31) と同じ形になる．

そこで (16.7) と同じようにして，この (16.31) を取り扱っていくことにしよう．漸近的な様子は，主に $e^{\pm\frac{1}{2}\zeta}$ という因子で決定される．しかし，ここでは指数としては負の方を取らねばならない．これにかかるべき級数は ζ^s という項で始まるとすると $s=\pm\frac{1}{2}m$ であることはすぐわかる．だから，ここで

$$f(\zeta)=e^{-\frac{1}{2}\zeta}\zeta^{\frac{1}{2}|m|}L(\zeta) \tag{16.34}$$

とおいて，(16.31) に代入すると，Lの方程式として

$$\zeta L''+(|m|+1-\zeta)L'+[\lambda_1-\tfrac{1}{2}(|m|+1)]L=0 \tag{16.35}$$

が得られる．(16.12) のときと同じく，Lの級数解が有限のところで終らないなら，波動関数 (16.34) は ζ の大きいところで無限大となる．有限項で切れる解は，Laguerreの随伴多項式になるわけだが，(16.20) と (16.35) を比べると，それらは $L_{n_1+|m|}^{|m|}(\zeta)$ であることがわかる．ただし

$$n_1=\lambda_1-\tfrac{1}{2}(|m|+1) \tag{16.36}$$

は正の整数または0である．

同じようにして，η の方程式の解では

$$n_2=\lambda_2-\tfrac{1}{2}(|m|+1) \tag{16.37}$$

が正の整数か0かであることがわかる．(16.36) と (16.37) とから

$$\lambda_1+\lambda_2=n_1+n_2+|m|+1\equiv n \tag{16.38}$$

となり，このnは0を含まぬ正の整数である．(16.32)，(16.33)，および (16.38) をまとめると，エネルギー準位は

$$E_n=-|E_n|=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}=-\frac{\mu Z^2e^4}{2\hbar^2n^2}$$

となり，前の (16.15) と一致している．(16.38) によると，nをつくる三つの量子数 n_1, n_2, m のとり方にはいろいろの組み合わせがあるから，エネルギー準位 E_n は縮退しているわけである．$m=0$ の場合には，n_1, n_2 の選び方はn通り；$|m|>0$ のときは，mのとり方に二通り ($=\pm|m|$)，n_1 と n_2 のとり方に $n-|m|$ 通りあるから，結局エネルギー準位の縮退は全部で

$$n+2\sum_{|m|=1}^{n-1}(n-|m|)=n+2\left[n(n-1)-\frac{n(n-1)}{2}\right]=n^2$$

となり，これも前の結果と一致する．

16-9 波 動 関 数

今まで調べてきたことから明らかなように，規格化されていない放物線座標での水素原子の波動関数は

$$u_{n_1n_2m}(\xi,\eta,\phi)=e^{-\frac{1}{2}\alpha(\xi+\eta)}(\xi\eta)^{\frac{1}{2}|m|}L_{n_1+|m|}^{|m|}(\alpha\xi)L_{n_2+|m|}^{|m|}(\alpha\eta)e^{im\phi}$$

$$\alpha=\frac{\mu Ze^2}{\hbar^2(n_1+n_2+|m|+1)}$$

となる．エネルギー準位 E_n と磁気量子数 $m(n>|m|)$ との値がきまっていると，放物

線量子数 n_1, n_2 は $n_1+n_2=n-|m|-1$ が成り立つようにとればいいのだから，$n-|m|$ 通りの選び方がある．また同じく，n と m が決まっているときに，球座標での方位量子数 l は $|m|\leqq l\leqq n-1$ が成り立つようにとれるからやはり $n-|m|$ 通りの選び方がある．だからこういう ξ と η との関数の積は $n-|m|$ 個あるが，それらは r と θ の関数の $n-|m|$ 個の積の一次結合になっている．

基底状態のエネルギー準位を見れば，放物線座標の解と球座標の解との間の関係が特によくわかる．基底状態では $n_1=n_2=m=0$ だから放物線座標の解は $e^{-\mu Ze^2(\xi+\eta)/2\hbar^2}$，またこの状態は $n=1$．$l=m=0$ だから球対称の解は $e^{-\mu Ze^2 r/\hbar^2}$ である．(16.25) からこの二つの解は全く同じものであることがわかる．

問　　題

1．Bohr-Sommerfeld の量子化の規則（§2参照）を適用して，調和振動子および水素原子の円形軌道のエネルギー準位を決定せよ．その結果を，この章で得られた結果と比較せよ．

2．調和振動子に対する振動波束の解に，主として寄与する状態の量子数およびエネルギーの拡がりの大きさはどの程度か？

3．Hermite の多項式の母関数を使って，積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n{}^*(x)x^2u_m(x)dx$$

の値を求めよ．ただし，u は規格化された調和振動子の波動関数である．

4．Legendre の多項式の母関数を使って，積分

$$\int_{-1}^{1} P_l(w)P_{l'}(w)dw$$

の値を求めよ．

5．V_0a^2 が $\pi^2\hbar^2/8m$ より僅かに大きいような角井戸型ポテンシャルのエネルギー準位 $(l=0)$ の近似式を解析的にあらわせ．

6．角井戸型ポテンシャルにおいて，0より大きな値の l を持つ新しいエネルギー準位でちょうど束縛状態を作るにたる V_0a^2 の値は $\hbar^2z^2/2m$ で与えられることを示せ．ただしこの z は $j_{l-1}(z)=0$ の方程式を満足する零でない解である（p. 101 の脚注参照)．

7．重水素を作っている中性子と陽子との間の相互作用は，$a=2.00\times10^{-13}$cm の角井戸型のポテンシャルで表わすことができると仮定する．この系の最低のエネルギー準位 $(l=0)$ が -2.23 Mev (10^6 ev) として，V_0 を有効数字三桁まで計算せよ．この答えを問題5で導いた近似式から得たものと比べればどうか？

8．式 (14.17) で $l=0$, $V(r)=-V_0e^{-r/a}$ としたものを考える．変数を r から $z=e^{-r/2a}$ に変え，その結果 Bessel の方程式が導かれることを示せ．z の関数としての χ にはどんな境界条

件を課せばよいか？ また，エネルギー準位を決めるのにどういうふうにこれらの条件は用いられるか？ 束縛状態が存在するための V_0 の下限はいくらか？

9．完全剛体の壁をもつ二次元の円形の箱の中での粒子の固有関数とエネルギー準位をあらわす式を求めよ．

10．一次元の角井戸型のポテンシャルでは，V_0a^2 が正でありさえすれば結合状態があることが§9で示され，また三次元の球対称の角井戸型のポテンシャルでは，$V_0a^2>\pi^2\hbar^2/8m$ のときに限って，結合状態が存在することが§15で示されている．同様のことは二次元の円対称な角井戸型のポテンシャルではどうなるか？ また，この結果に物理的意味をつけるとしたらどういうことになるか？

11．ある固定軸の回りを回転させられている剛体に対する Schrödinger の方程式は，この軸に関する慣性能率を I とすると

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}$$

となる．ただし，$\psi(\phi,t)$ は時間 t と，この軸の回りの回転角 ϕ との関数である．この方程式の解にはどんな境界条件を適用しなければならないか？ 規格化されたエネルギー固有関数と固有値とを見出せ．縮退は存在するか？

12．三次元の等方的な調和振動子 $(V(r)=1/2Kr^2)$ のエネルギー準位を，波動方程式を直交座標で解いて求めよ．それぞれの準位の縮退はどのようであるか？ またこの方程式は，球座標によっても円捧座標によっても分離できることを示せ．

13．水素原子の n 番目の量子状態における電子の位置エネルギーの期待値は $-Z^2e^2/a_0n^2$ であることを示せ．この結果から運動エネルギーの期待値を見出せ．

14．$n=2$，$m=0$ のときの放物線座標における規格化された水素原子の波動関数を見出せ．それらを球座標における $n=2$，$m=0$ のときの波動関数であらわせ．

15．放物線座標における水素原子の波動関数にパリティがあればそれを論ぜよ．

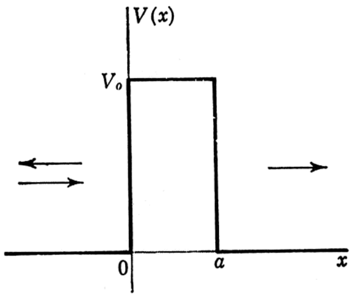
第V章　連続固有値：衝突の理論

エネルギー固有値が連続的に分布しているような問題は，通常，粒子とある力の場との衝突に関連して起こってくる．この場合，問題を解いてゆくやり方は前章で用いたやり方とは異なってくる．前章では，十分遠方での境界条件が粒子の離散的な固有値を定めるために用いられてきた．衝突の問題では，まずあらかじめエネルギーが指定されていて，非常な遠方での波動関数の振舞いがそのエネルギーを使って求められ，次いでこの漸近的な振舞いを粒子が力場によって散乱される量に関係づけることができることになる．

第IV章でのように，この場合でも，正確に求められる解は比較的少数であるが，それらはちよっと見て考えられるよりもずっと広く応用しうるものである．というのは，それらの解はもっと複雑な系についての近似的な計算の基礎として役立つものであるからである．なお注意すべきことは衝突現象の研究は，原子核や素粒子の問題に関連して特に重要になる，ということである．というのは，これらの分野ではその他の方法によっては比較的とぼしい資料しか得られないからである．

17□一次元の箱型ポテンシャルの障壁

まず，1個の粒子と第14図に示されているような箱型ポテンシャルの障壁との一次元の衝突を考えてみよう．この問題では，x の負の領域から近づいてきて障壁で反射されたり，またはこれを透過したりする粒子を考える．これに対応する古典論の問題では，粒子のエネルギー障壁の頂上よりも小さければ必ずはねかえされるし，それより大きいときには必らずそれを透過する．後でわかるように，量子力学では，大抵のエネルギーの粒子に対して，反射と透過とがどちらも有限の確率で起きることになる．この問題では，はじめから正の x と負の x とが対称になっていないのだから，§9のようにきまったパリティを持つ解を扱うことは不便であり，したがってまた $V(x)$ を $x=0$ について対称



第14図　高さ V_0，厚さ a の一次元箱型ポテンシャルの障壁

にする理由もない．そこで $x<0$ および $x>a$ では $V(x)=0$, $0<x<a$ では $V(x)=V_0$, ただし V_0 は正であると仮定しておく．

17-1　波動関数の漸近的な振舞い

まず問題になるのは，ポテンシャルの障壁に対して左から $E>0$ のエネルギーで近づいてきて，障壁によってときにははね返えされたり，あるいは障壁を貫通したりする粒子を表わす波動関数をつくることである．つまり，漸近的な（つまり $V(x)=0$ の領域での）波動関数の振舞いは次のようなものになる：$x<0$ の領域では右へ進む粒子（入射粒子）と同時に左に進む粒子（反射粒子）を表わす波動関数がほしいわけであるが，$x>a$ の領域では波動関数は右に進む粒子（透過粒子）のみを表わせばよいわけである．

力が作用しない領域で，一定のエネルギーで，一定の方向に運動している粒子は必ず一定のきまった運動量をもち，したがってもし粒子が正の x 方向へ運動量 p で運動している場合には，一次元の運動量固有関数 $u(x)\propto e^{ipx/\hbar}$ で表わすことができる．同様にまた，同じ運動量で，負の x 方向へ運動している粒子には波動関数 $u(x)\propto e^{-ipx/\hbar}$ を使えばよい．結局 $V(x)=0$ の領域での波動方程式は，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}=Eu$$

であるから，漸近的の解は次のようになる．

$$\begin{aligned} u(x)&=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}, \qquad x\leq 0\\ u(x)&=Ce^{ikx}, \qquad x\geq a \end{aligned} \tag{17.1}$$

ただし，$k=p/\hbar=+(2mE/\hbar^2)^{1/2}$ は伝播ベクトルの大きさである．解（17.1）は，ポテンシャルが第14図に示されたような形をとるかどうかにかかわらず，任意の散乱ポテンシャルに対してその外部の力の作用していない領域においては常にあてはまるものである．

17-2 規　格　化

係数 A, B, C の物理的な意味は，(17.1) を方程式 (7.3) であたえられた，一次元の確率の流れの密度に代入してみればわかる．すなわち

$$\begin{aligned} S(x)&=v(|A|^2-|B|^2), \qquad x<0 \\ S(x)&=v|C|^2, \qquad x>a \end{aligned} \tag{17.2}$$

ただし，$v=\hbar k/m$ は伝播数 k をもつ粒子の速さである．これらの表式は x に関係していないから，§7の議論によって，これらは二つの領域で（右への流れを正として）さしひきでの正味の流束量になっていると解釈しておいてよい．この解釈は，上に述べた A, B, C をそれぞれ入射，反射，透過の波動関数の振幅とするという言い方とも両立する．

波動関数（17.1）を絶対的な意味で規格化することは，この問題に対しては重要ではない；というのは，問題になるのは，この障壁に対する粒子の反射の係数および透過の係数になっている $|B|^2$ および $|C|^2$ の $|A|^2$ に対する比だけだからである．しかし，入射してくる波動関数を単位の流束になるように規格化するのが都合がよいこともある；これは $A=1/v^{1/2}$ ととることに相当している．このように規格化することは，$u(x)$ が1個以上の粒子を表わしていることを示すものと解釈されるべきではなく，むしろ§7の意味で，〔各々が $u(x)$ で表わされる〕合同かつ独立で，重なり合わない十分多数の系を考えて，ちょうど入射する流束がそれらの全体で単位に等しくなることを意味しているのである．もっとはっきりはしているが，ある意味では便宜さの点で劣る規格化の方法としては，周期的な境界条件をもつ長さ L の一次元の“箱”を考えて，$\int_{(L)}|u(x)|^2dx=1$ となるようにすることも考えられる．

17-3 散　乱　係　数

ポテンシャルの障壁の内部での解の性質は，E が V_0 よりも大きいかまたは小さいかに

よって変わってくる．まず $E>V_0$ としよう．そうすれば障壁の内部での伝播数は：$\alpha=[2m(E-V_0)/\hbar^2]^{1/2}$ と定義できる．すると，内部での解は

$$u(x)=Fe^{i\alpha x}+Ge^{-i\alpha x},\qquad 0\leq x\leq a \tag{17.3}$$

となる．境界条件によって要求される $x=0$ および $x=a$ における u と du/dx との連続性ということからは，5つの係数の間の4つの関係式が得られる．それらから，F と G とを消去して比 B/A および C/A について解くことができて，その結果は

$$\begin{aligned}\frac{B}{A}&=\frac{(k^2-\alpha^2)(1-e^{2i\alpha a})}{(k+\alpha)^2-(k-\alpha)^2e^{2i\alpha a}}\\ \frac{C}{A}&=\frac{4k\alpha e^{i(\alpha-k)a}}{(k+\alpha)^2-(k-\alpha)^2e^{2i\alpha a}}\end{aligned}\tag{17.4}$$

となる．(17.4) の比の絶対値の2乗は，散乱の係数（すなわち反射および透過の係数に）に他ならない．

$$\begin{aligned}\left|\frac{B}{A}\right|^2&=\left[1+\frac{4k^2\alpha^2}{(k^2-\alpha^2)^2\sin^2\alpha a}\right]^{-1}=\left[1+\frac{4E(E-V_0)}{V_0{}^2\sin\alpha a}\right]^{-1}\\ \left|\frac{C}{A}\right|^2&=\left[1+\frac{(k^2-\alpha^2)^2\sin^2\alpha a}{4k^2\alpha^2}\right]^{-1}=\left[1+\frac{V_0{}^2\sin^2\alpha a}{4E(E-V_0)}\right]^{-1}\end{aligned}\tag{17.5}$$

予想されるように，$|B/A|^2+|C/A|^2=1$ であることは (17.5) からすぐ証明される．

(17.5) は，粒子のエネルギーが障壁の頂上のエネルギーに近づくと ($E\rightarrow V_0$)，透過係数が

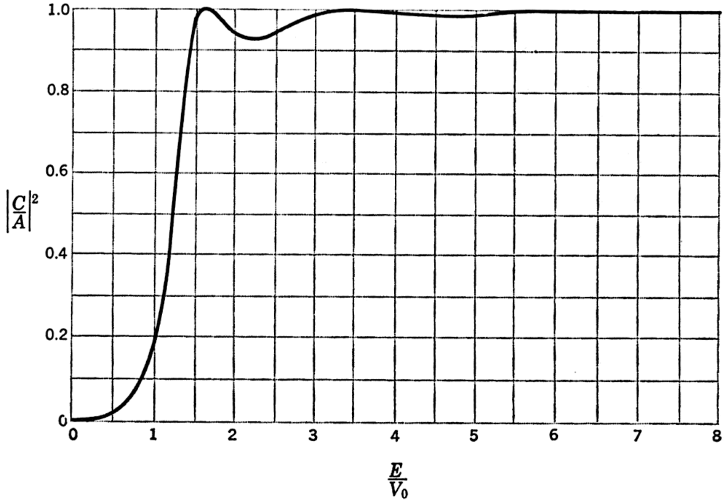
$$\left(1+\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}\right)^{-1}\tag{17.6}$$

という値に近づくことを示している．E が増してゆくと ($E>V_0$)，透過係数はだんだんと増していく下縁の包絡線と1との間で振動する（第15図を見よ）．障壁が半波長の整数倍を含んでいるとき，すなわち $\alpha a=\pi, 2\pi, \cdots$ のときには完全な透過がおきる[1]．この型の干渉現象は，屈折率の違った薄い層を通る光についてもよく知られているところである．

$0<E<V_0$ に対する反射と透過の係数は，(17.4) の α の代りに $i\beta$ を置き換えることによってたやすく求められる．ただし，

---

1)　この現象は，$V_0<0$ のときにも起こる．このときは箱型の障壁は角型の井戸になる．そのときの散乱係数は (17.5) で与えられる．ただし，そのためには式中の V_0 および α の中に現われる V_0 の符号を変えておかなければならない．



第15図 $mV_0a^2/\hbar^2=8$ の場合の箱型の障壁での，粒子のエネルギーとしての透過係数

$$\beta=\left[\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

である．その結果透過係数の式は

$$\left|\frac{C}{A}\right|^2=\left[1+\frac{V_0{}^2\sinh^2\beta a}{4E(V_0-E)}\right]^{-1} \tag{17.7}$$

となる．これは，E が V_0 から減っていくにしたがって，(17.6) の値から単調に減ってゆく．このような効果を指して，ポテンシャルの障壁に対する**貫通現象** (*tunneling*) とよぶことがよくある．$\beta a\gg 1$ のときには，透過係数 (17.7) は非常に小さくなり，近似的には次の式で与えられる．

$$\frac{16E(V_0-E)}{V_0{}^2}e^{-2\beta a} \tag{17.8}$$

第 15 図は，どちらかといえば“不透明”な障壁：$mV_0a^2/\hbar^2=8$ の場合について，(17.5) および (17.7) から求めた透過係数の曲線である．

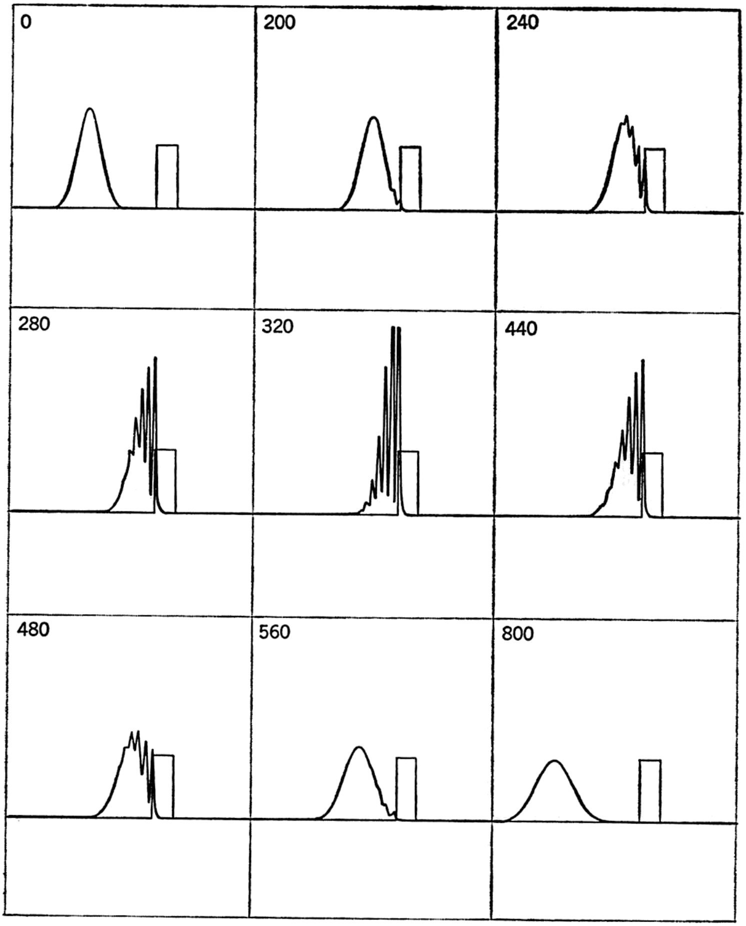
17-4 波束の散乱

以上の散乱の取り扱いは，入射運動量の特定値に対応する (8.2) の時間を含まない波動方程式の定常解を利用するものである．他に，(6.16) の時間を含む波動方程式を使うやり方もやはり可能である．ただし，たとえ一次元の場合であっても x と t という2個の独立変数についての偏微分方程式を取り扱わねばならないために，このやり方は比較的に困難なものになるということがある．しかし，一方では，このやり方によれば§12で議論しておいた一般形をもつ1個の波束の運動を調べて，それがポテンシャルによって反射されたり，ポテンシャルの障壁を透過したりする模様を明らかにすることができるという利点がある．

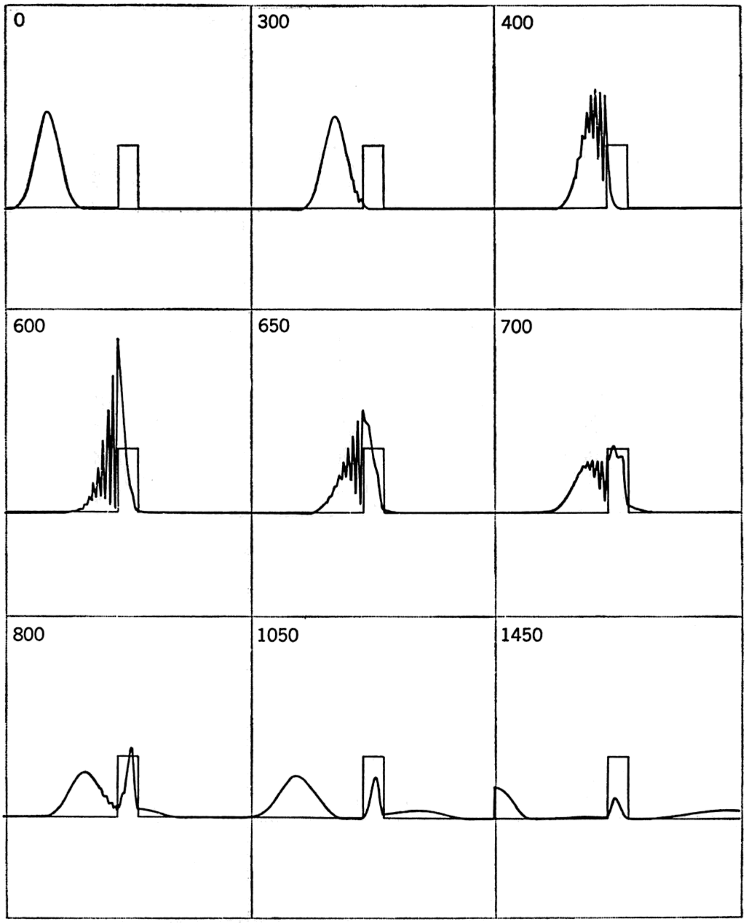
この問題の攻め方には2通りのやり方がある．(時間を含む波動方程式の) 解は，(12.15) に示したようにエネルギーの固有関数について展開することができ，この固有関数の和をつくることは，(12.18) と (12.19) から (12.20) への移行の際に具体的に行なっておいた．1個の自由粒子を問題にしている§12においては解析的にこのことが実行できたとしても，ポテンシャルがある場合には，それは一般的には不可能なのである．もう一つのやり方は，方程式 (6.16) の数値積分を実行することである．つまり微小なしかし有限な時間々隔を選んで，時間についての微分方程式を一つの差分方程式で近似してゆくわけである．一次元の場合でさえ，このことは高速度の計算機を使って始めて実行可能になるのであり，さらに，問題を処理可能な形にするために特殊な計算技術が考案されねばならない．このような計算機によってつくられた映画[1)]の基礎になる莫大な個数のグラフの中から，典型的な幾つかをここに再録してある．

これらの計算では，$\hbar=1$ かつ $m=\frac{1}{2}$ になるように単位が選ばれている．長さの単位はまだ任意に選ぶことができ，それぞれのグラフに示されている横軸の全長より僅かに長いものがとられている．この場合，時間およびエネルギーの逆数は長さの単位の自乗である一つの単位を使ってそれぞれ表わされることになる．入射波束は (12.11) のガウス型のもので，$\Delta x=0.035$, $\langle p\rangle=50\pi, 70.7\pi$ および 100π にとってある．ポテンシャルは幅 $a=0.064$，強さ $V_0=\pm(70.7\pi)^2$ で，その結果入射波束の平均エネルギーは $\frac{1}{2}|V_0|, |V_0|$ および $2|V_0|$ に相当することになっている．第16図で順々に示されている映画の各こまは，入射波束の平均エネルギーがポテンシャル障壁の高さ V_0 の半

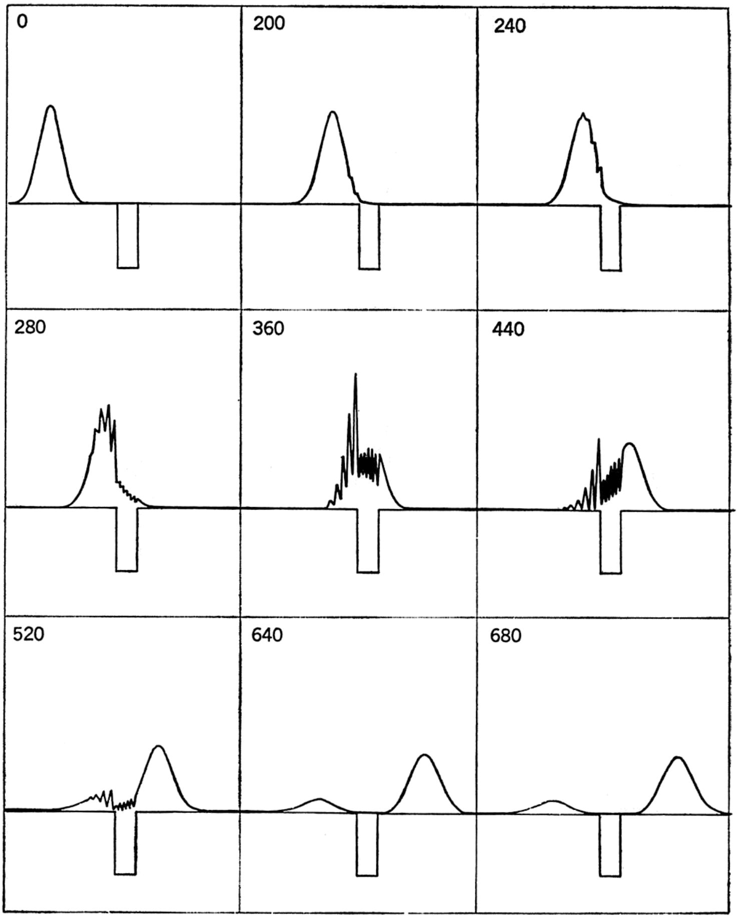
1) A. Goldberg, H. M. Schey and J. I. Schwartz, *Am. J. Phys.* **35**, 177 (1967)



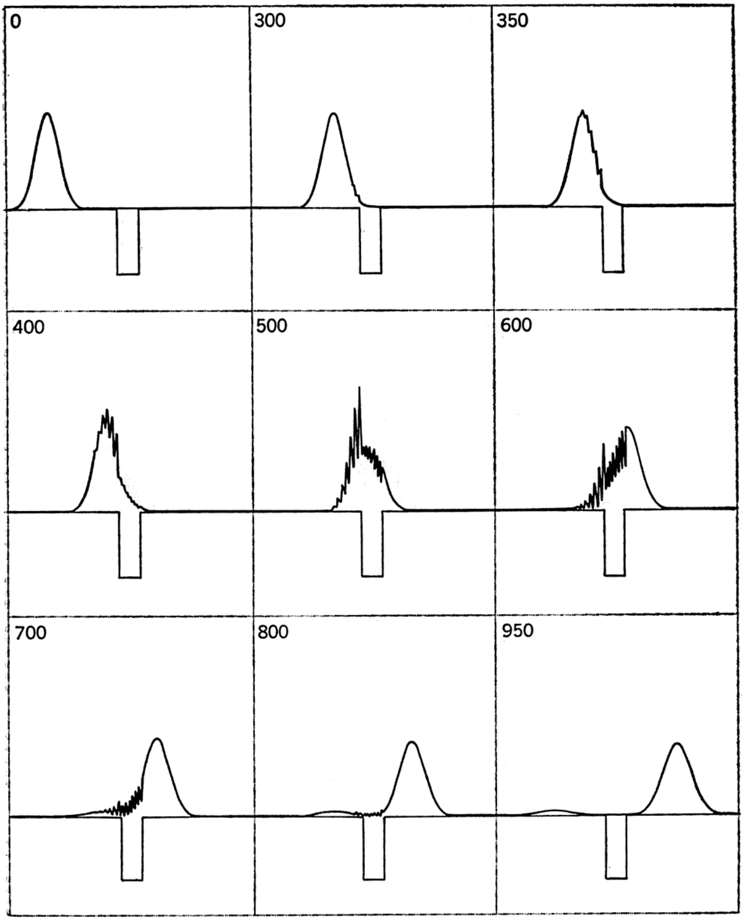
第16図 ガウス型波束の箱型ポテシシャル障壁による散乱．波束の平均エネルギーが障壁の高さの半分の場合．



第17図　第16図と同じ．ただし，波束の平均エネルギーがポテンシャル障壁の高さに等しい場合．



第18図 ガウス型波束の角井戸型ポテンシャルによる散乱．波束の平均エネルギーがポテンシャルの深さの半分の場合．



第19図　第18図と同じ．ただし，波束の平均エネルギーがポテンシャルの深さに等しい場合．

分である場合で，第17図の各こまは平均エネルギーがちょうど V_0 になっている場合である．第18および19図には，ポテンシャルが引力の場合について，波束の平均エネルギーがポテンシャルの井戸の深さの半分のとき，ちょうど等しいときがそれぞれ示されている．これらのすべての場合を通じて，縦軸には $|\psi|^2$ が，横軸には x がとられており，さらにポテンシャルの幅および位置が書き添えられている；各こまの隅の数字は任意の単位でとった時間を示している．ポテンシャル障壁内で粒子の平均運動エネルギーが零である場合にあたっている，第17図では，確率（分布の形）がゆっくりと壊れていったあげく，障壁内部で前後にひきちぎられていく様子を示している点で特に興味深い．

18□三次元での衝突

この章で問題にしているのは本来，一個の粒子が空間に固定された力の場と衝突するとか，あるいは二個の粒子が相互に衝突するとか，ともかく三次元での衝突なのである．§16 で示されたように，二つの粒子の相対的な位置に関係するような力だけが存在するときの二粒子の非相対論的な運動の問題は，二つの一粒子問題（単体問題）に分離することができる．そのうちの一方は，二つの粒子の相対的な運動，いいかえると重心に対する各粒子の運動を記述し，もう一方は重心の自由運動を記述する．ところが，§16 でのように内部運動のエネルギー準位を計算するときには，重心は静止しているものと考えておいてよかったが，衝突の際の重心の一定の運動は，実験の結果を計算する場合無視できなくなる．これは，通常の実験室での手続として，最初静止している粒子に（16.5）の $E_0=E+E'$ の全エネルギーをもつ粒子をぶつつけるということになっているからである．つまり，二つの粒子の相対運動のエネルギー E はぶつつけるときの全エネルギー E_0 とは異なっていて，実際に観測される散乱は標的になる粒子と重心のどちらが最初に静止しているかによってちがってくるからである．

標的になる粒子が，最初に静止している座標系を，**実験室の座標系** ***laboratory coordinate system*** とよび，衝突する二つの粒子の重心が（最初に，したがって常に）静止している座標系を**重心座標系** ***centre-of-mass coordinate system*** とよぶことにする．明らかに，衝突の実験結果の計算には，重心系を使った方が実験室系を使うより便利である．というのは，後者では6個の自由度が現われるのに比べて，前者では3個の

自由度があるだけだからである．しかも重心系での衝突の過程は，（16.4）の換算質量 $\mu=m_1m_2/(m_1+m_2)$ と初速度 v をもつ一つの粒子が，固定された散乱中心に衝突するというふうに考えておけばよい［下の（18.9）の議論をみよ］．散乱粒子の角度分布は，重心系で計算しておいて，それから観測が実際に行なわれている実験室系へ変換すれば求められるはずである．*)

18-1　散乱の断面積

固定された力の中心，または他の粒子によって散乱された粒子の角分布を表わすには，散乱断面積という量を使うのが便利である．n 個の粒子群または散乱中心に対して，単位面積，単位時間当りに N 個の粒子が平行にとんでくる粒子束をぶっつけたとして，それらの粒子の中で単位時間に小さな立体角 $\Delta\omega_0$ の中に現われてくるものの数を数えることにしよう．ただし，ここで小さな立体角 $\Delta\omega_0$ は入射粒子の方向を極軸として極座標ではかって，θ_0, ϕ_0 の角度の方向を中心としてとるものとする．この粒子の束が，十分小さくしぼってあって，ぶっつける粒子の間で干渉がおこったりすることがないものとし，また標的になっている粒子が反動で標的の領域からはじき出されてその数がかなり減ってしまうこともないとし，さらに標的になる粒子も互いに十分はなれていて，そのため，それぞれの衝突は標的になる粒子一個を含む過程としてよいとすれば，この出てくる粒子の数は $N, n, \Delta\omega_0$ に比例するはずである．

その結果，単位時間に $\Delta\omega_0$ の中に出てくる入射粒子の数は次のようにかける．

$$nN\sigma_0(\theta_0,\phi_0)\Delta\omega_0 \tag{18.1}$$

この比例因子 $\sigma_0(\theta_0,\phi_0)$ は散乱の**微分断面積** *differential scattering cross section* とよばれている．（18.1）は，時間の逆数のディメンジョンをもつから，$\sigma_0(\theta_0,\phi_0)$ は面積のディメンジョンをもっている．一つの標的粒子または散乱中心によって $\Delta\omega_0$ に散乱されてくる粒子の数 $\sigma_0(\theta_0,\phi_0)\Delta\omega_0$ は，面積 $\sigma_0(\theta_0,\phi_0)\Delta\omega_0$ の断面中に含まれている，はじめの平行な入射ビーム中の粒子の個数に等しい．**) $\sigma_0(\theta_0,\phi_0)$ の全球面上での積分

---

*)　本文では特にことわってないが，以下では実験室系に関する量には添字0をつけて区別してある．なお，重心，重心座標系等は正しくは質量中心，質量中心座標系とよぶべきであるが，ここでは慣用に従った。

**) ただしこの議論は入射粒子束を規格化するやり方として§17-2でのべた単位粒子束での規格化を使ってのことである．

$$\sigma_0=\int \sigma_0(\theta_0, \phi_0)d\omega_0 \tag{18.2}$$

は**全散乱断面積** *total scattering cross section* とよばれる.

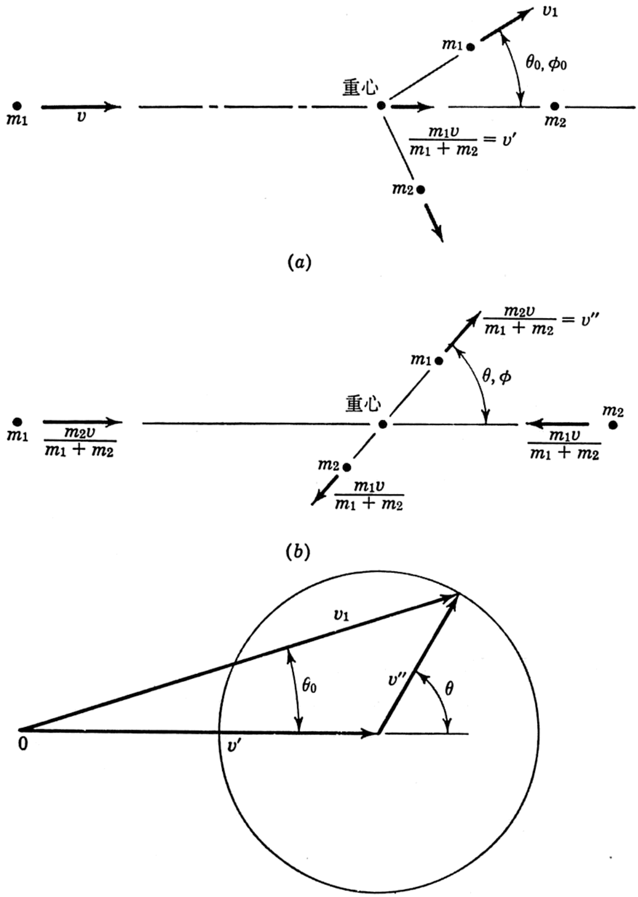
粒子が，ある固定された散乱中心と衝突する場合には，散乱中心は固定されているのだから無限大の有効質量をもっているわけで，したがって系の重心は動かない．ゆえに，微分断面積の定義（18.1）は実験室系，および重心系を通じて等しく成り立っている．しかしながら，有限な質量をもった二つの粒子の間の衝突の場合には，（18.1）の微分断面積が適用できるのは一般には実験室系について，かつ散乱されてくる入射粒子の観測に対してだけである．つまり，それは実験室系でも反跳をうけた標的粒子の観測を表わしているものではない．勿論，$\sigma_0(\theta_0, \phi_0)$ を使って反跳粒子に対する微分断面積を求めることは可能である．重心系についても，微分断面積 $\sigma(\theta, \phi)$ を（18.1）にならって定義することができる．ただし，この場合でも散乱されてくる入射粒子は観測される方であり，入射粒子束Nは重心に対してではなく標的の粒子に対してはかられたものである．重心系では衝突後，二つの粒子はお互いに正反対の方向に運動するから，θ, ϕ の方向で反跳をうけた標的粒子を観測したときの微分断面積は，丁度 $\sigma(\pi-\theta, \phi+\pi)$ になっている．

18-2 実験室系と重心系での散乱角の関係

実験室系と重心系での散乱角および微分断面積の間の関係を求めようと思えば，重心が丁度静止してくれるような適当な速度で実験室系を入射粒子の方向に並進運動させるような変換を考えればよい．第20図 a は質量 m_1，初速度 v の粒子が質量 m_2 で最初静止している粒子にぶっつかるところを示している；運動量の保存の法則からわかるように，重心は右の方に $v'=m_1v/(m_1+m_2)$ の速さで動いている．したがって，重心系では質量 m_1, m_2 の粒子は，それぞれ速さ

$$v''=v-v'=\frac{m_2v}{(m_1+m_2)}, \quad \text{および} \quad v'$$

で重心に近迫してゆくことになる；もしも衝突が弾性的であれば，明らかにこれらの粒子は衝突後は同じ速さで重心から遠ざかってゆく［20図 b を見よ］．この情況の幾何学的な条件からわかるように，θ, ϕ と θ_0, ϕ_0 とは次のような関係で結ばれている．



(c)

第20図 (*a*) 実験室系．この系では，質量 m_2 の標的粒子は最初静止している．
(*b*) 重心系．この系では，重心は最初従って常に静止している．
(*c*) 実験室系での重心の速度 ($\mathbf{v}'$) と重心系での観測粒子の速度 ($\mathbf{v}''$) のベクトル和．この和のベクトルは実験室系で観測される速度 ($\mathbf{v}_1$) になる；もしも $v''<v'$ であれば角度 θ_0 は $\sin^{-1}(v''/v')$ をこえることはできない．

$$v''\cos\theta+v'=v_1\cos\theta_0$$
$$v''\sin\theta=v_1\sin\theta_0 \qquad (18.3)$$
$$\phi=\phi_0$$

方程式 (18.3) の最初の二つの式から，v_1 を消去して次式を得る．

$$\tan\theta_0=\frac{\sin\theta}{\gamma+\cos\theta},\qquad \gamma=\frac{v'}{v''}=\frac{m_1}{m_2} \qquad (18.4)$$

(18.3) と (18.4) の方程式は，非弾性衝突に対しても同様に正しいとすることができる．そこで，質量 m_1 の粒子が，始めに静止している質量 m_2 の粒子にぶっつかって，その衝突の後に $m_1+m_2=m_3+m_4$ を満たす質量 m_3 および m_4 の粒子が発生するという一般的な二体衝突（たとえば，原子核反応）を考えよう．また，大きさQのエネルギーが，内部エネルギーから発生粒子の運動エネルギーに転換されて（発熱的な衝突ではQは正，吸熱的衝突ではQは負になる)，質量 m_3 の粒子が観測される場合にも方程式 (18.4) の中の最初のものは成立する．γ はこの場合にもやはり実験室系における重心の速さと重心系における観測粒子の速さとの比に等しいことには変わりはない．しかしながら，この場合にはその γ は m_1/m_2 にはならなくて次式で与えられることを示すことができる．

$$\gamma=+\left(\frac{m_1m_3}{m_2m_4}\frac{E}{E+Q}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (18.5)$$

ただし，$E=m_1m_2v^2/2(m_1+m_2)$ は相対運動に最初付随していた運動エネルギーを重心系で表わしたものである [次の (18.9) の方程式の議論を見よ]．

18-3 実験室系と重心系での散乱断面積の関係

実験室系と重心系での断面積の間の関係は，それらの定義から求めることができる．すなわち，定義によれば方向 θ,ϕ の回りの小さな立体角 $d\omega$ に散乱されるのと同数の粒子が方向 θ_0,ϕ_0 の回りの $d\omega_0$ に散乱されるはずである．したがって

$$\sigma_0(\theta_0,\phi_0)\sin\theta_0 d\theta_0 d\phi_0=\sigma(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi \qquad (18.6)$$

となる．方程式 (18.3) の最後の式と方程式 (18.4) の最初の式を使って，(18.6) の方程式を書き直すと次のようになる．

$$\sigma_0(\theta_0,\phi_0)=\frac{(1+\gamma^2+2\gamma\cos\theta)^{\frac{3}{2}}}{|1+\gamma\cos\theta|}\sigma(\theta,\phi) \qquad (18.7)$$

ただし，γ は一般には方程式 (18.5) で与えられるものである．注意すべきことは，全

断面積の方は実験室系および重心系の両者に対し，また両方の外向きに出てゆく粒子を通じて同一であることである．このことは，衝突がおこる全回数はその過程の記述の仕方には無関係であることによるものである．

18-4　散乱角の γ による変化

$\gamma<1$ の場合には，方程式（18.4）からわかるように θ が0から π まで増えてゆくにつれて θ_0 も0から π まで単調に増加する．$\gamma=1$ の場合には，$\theta_0=\frac{1}{2}\theta$ となり，θ が0から π まで変化するにつれて θ_0 は0から $\frac{1}{2}\pi$ まで変化する；最後の場合には

$$\sigma_0(\theta_0, \phi_0)=4\cos\theta_0\sigma(2\theta_0, \phi_0)$$

となり，実験室系では後方の半球内には粒子は現われないことになる．$\gamma>1$ の場合には，θ が0から増していって $\cos^{-1}(-1/\gamma)$ になるにつれて，θ_0 もまず0から増していって $\frac{1}{2}\pi$ より小さい $\sin^{-1}(1/\gamma)$ のところで極大になる；その後は，θ がさらに π まで増えるにつれて θ_0 は減ってゆき0になる．この場合，$\sigma_0(\theta_0, \phi_0)$ は θ_0 の極大値で無限大になるのが普通である．ただし，この特異性は全断面積には有限の寄与しか与えない；実験室系では，極大の θ_0 以上の散乱角の粒子は現われない．0と $\sin^{-1}(1/\gamma)$ の間の特定の値の θ_0 を与える θ の値は二つあるが，この二つは観測される粒子のエネルギーが，小さい方の θ に対して大きいということで見分けることができる．

この最後の場合（$\gamma>1$）が，20図(c)で図式的に示されている．重心系での観測される衝突後の粒子の速度 $\mathbf{v}''$ と実験室系での重心の速度 $\mathbf{v}'$ との合成ベクトルが実験室系で観測された粒子の速度 $\mathbf{v}_1$ を与える．ベクトル $\mathbf{v}_1$ の終点の軌跡は，その起点を点0にとったとき半径 v'' の円になる．したがって $v''<v'$ のときには合成速度 $\mathbf{v}_1$ の入射方向との角度 θ_0 は角度

$$\sin^{-1}\frac{v''}{v'}=\sin^{-1}\frac{1}{\gamma}$$

を超えることはできない．比 $\gamma=v'/v''$ が減ってゆくにつれて，円は相対的に大きくなりベクトル $\mathbf{v}_1$ のとりうる角度の領域も増してくる．

以上の議論で用いた幾何学的な関係は，古典的な系の場合と同じく量子力学的な系についても成り立っている．というのは，上の関係は本質的には漸近的な領域で適用される運動量ベクトルの間の関係であり，この領域では粒子は空間的に正確に局在化される必要はなく，したがって一定の運動量を持ちうるからである．

電子と原子との衝突では，衝突粒子間の質量比が大きいため，実験室系と重心系との相違は無視しうるということは注目すべき興味ある事実である．ただし，原子核の衝突では，この二つの座標系の間の相違は意味をもってくるのが普通である．

18-5 波動関数の漸近形

重心系における散乱の微分断面積は，相対運動に対する波動方程式である（16.5）の二番目の方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 u+Vu=Eu \tag{18.8}$$

の漸近形を使って求めることができる．波動関数 u は，第20図 b の角 θ, ϕ および二つの粒子の間の相対距離 r の関数として書き表わすことができる．方程式（16.4）から，換算質量は $\mu=m_1m_2/(m_1+m_2)$ になる．相対運動に伴うエネルギー E は，第20図から容易にわかるように

$$E=\frac{m_2}{m_1+m_2}E_0 \tag{18.9}$$

となる．ただし，E_0 は入射粒子の最初のエネルギーである．注意すべきことは，E はその質量が換算質量で，その速さが相対的な速さ v の一個の粒子の運動エネルギーに等しいということである．その結果，方程式（18.8）は質量 μ，最初の速さ v で運動エネルギー $E=1/2\mu v^2$ の一つの粒子と，ポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{r})$ で記述されるある固定した散乱中心との衝突をあらわすものとみなすことができる；この場合は，$\mathbf{r}$ は仮想的な粒子 μ から散乱ポテンシャルの原点までの距離ベクトルである．

§17の場合と同様に，散乱は $V=0$ の領域における $u(r,\theta,\phi)$ の漸近形によってきまる．衝突し合う粒子が十分離れてしまったときには，u としては，速さ v である特定の方向に運動している質量 μ の入射粒子を表わしている部分と動径方向に外向きに運動している粒子を表わしている部分とを含んでいるものがほしいわけである：すなわち

$$u(r,\theta,\phi)\underset{r\to\infty}{\longrightarrow}A[e^{ikz}+r^{-1}f(\theta,\phi)e^{ikr}],\qquad k=\frac{\mu v}{\hbar} \tag{18.10}$$

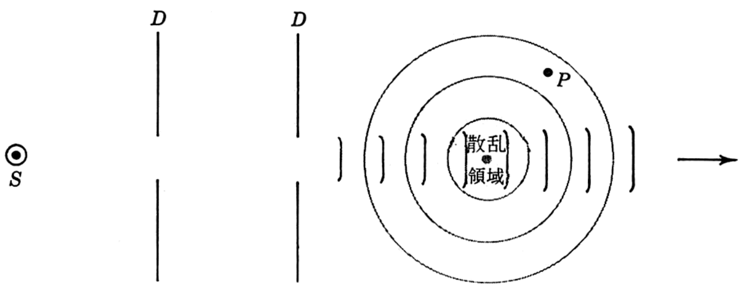
（18.10）の第一項は正の z 方向，いいかえれば $z=r\cos\theta$ だから $\theta=0$ の極軸に沿って運動している粒子を表わしている；これは，伝播ベクトル $\mathbf{k}$ の大きさを k，その方向

を極軸に平行にとれば，丁度（11.2）の運動量の固有関数の形をもつ無限に広がった平面波になっている．（18.10）の第二項は，外向きの動径方向に運動している粒子を表わしている；その振幅は，θ と ϕ によって変化するが同時に，動径方向の流束は距離の自乗に逆比例して減少しなければならないため，r に逆比例している．容易に証明できるように，（18.10）は関数 $f(\theta, \phi)$ の任意の形に対して，$V=0$ の領域では $1/r$ のオーダーの項に関しては方程式（18.8）の漸近的な解になっている．

18-6　波動関数の規格化

係数 A と角関数 f の物理的な意味は，§17のようにして粒子の流束を計算することによって見当をつけることができる．ただし，直接（18.10）を（7.3）の方程式に代入したのでは，大多数の実験装置では現われない入射波と散乱波の間の干渉がでてくることになる；この干渉が実験ではあらわれないということは，次のようにして理解することができる．

実際には，入射粒子と散乱粒子はその一方または他方を集束することによって，互いに分離されているものである．たとえば，第21図で略図が示されているような実験配置を考えてみよう．要するに，源 S からの衝突粒子は遮蔽膜 DD で集束されて十分よく定義された粒子線として出てくる．このような集束された粒子束は，実は e^{ikz} という形の無限にひろがった平面波ではなくて，それぞれの伝播ベクトルの大きさ，方向がごく僅かづつ違った無限の平面波を重ね合せてつくることができるものなのである．全体についての角度のひろがりはラジアンで測れば，粒子の波長と集束のための絞りの



第21図　散乱を測定する実験配置の略図．この場合には，観測点 P では入射波と散乱波の間の干渉はおこらない．

直径との比の程度のものであろうから，実際の場合にはごく小さくすることができる．ところで，fは通常角度によって余り急激には変化しないものである．したがって，入射波の伝播ベクトルの方向についての小さなひろがりはfには意味のあるほどの影響を与えない．したがって，観測点Pでは，fの項だけがあることになり，それは本質的には（18.10）に現われているものと同一のものと考えておいてよい．そして，入射束の方は平面波の項だけから計算できる，というのは散乱のおこっている領域から十分離れてしまえば，fの項は無視することができるからである．したがって観測を行なう領域では，干渉の項なるものは，（18.10）で無限にひろがった平面波を仮定したときに暗にもち込んだ理想化の結果に他ならないのであって，通常は物理的な意味をもたないものなのである．[1]

そこで，（18.10）の二つの項を別々に方程式（7.3）に代入すると，極軸に平行な入射束の大きさは $v|A|^2$ で，外向きの動径方向の散乱束の主な項の大きさは

$$\frac{v|A|^2|f(\theta,\phi)|^2}{r^2}$$

になることがわかる．断面積の定義から，次の関係を得る．

$$\sigma(\theta,\phi)=|f(\theta,\phi)|^2 \qquad (18.11)$$

§17で説明したように，散乱の計算に関する限り係数Aの選び方は重要なものではない．$A=1/v^{1/2}$ と選んで，単位の入射束を与えるように波動関数を規格化してもよければ，または週期性の条件をもった大きな箱について $\int|u|^2d\boldsymbol{r}=1$ とすることによって波動関数を規格化しておいてもよい．以下ではしばしばAを単に1に等しいとおくことがある．

19. 球対称ポテンシャルによる散乱

波動関数の漸近的な振舞いによって散乱の微分断面積はきまるが，漸近形それ自身は波動方程式（18.8）を全空間について解かなければきめられない．第IV章で考えたエネルギー準位の計算の場合と同様に，このことは波動方程式が変数分離できる場合にのみ可能である．そして，そのような場合の中，物理的に極めて興味のあるのはポテンシャル

1) 幾分例外的な場合としては，§20の終りでの議論を参照のこと．

エネルギーが球対称という特殊な場合である．ここでは，Vがrだけの関数であると仮定して，球面極座標で分離した解と（18.10）の漸近形との関連を調べてゆく．この手つづきは，**部分波の方法** *method of partial waves* とよばれている．

本章のこれから先のところでは，大抵の場合，ある粒子と固定された散乱中心との衝突と重心系で取り扱われた二粒子間の衝突とを区別しないことにする．

この節ではVが実の量である場合の弾性散乱を考える．Vを複素量にしたときの事情は §20 で議論される．この種の場合が興味があるのは，ある種の非弾性的な過程が複素ポテンシャルを使ったやり方で記述されるためである．

19-1　漸　近　形

今とり上げている問題は，極軸の回りに対称性をもっていることは明らかであるから，したがって u, f，および σ は角 ϕ に無関係である．そうだとすれば，方程式（18.8）の一般解は動径関数と Legendre 多項式の積の和とに書き表わすことができる（§14を見よ）．後で便利なように，これを次の形に書くことにする．

$$u(r,\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l R_l(r)P_l(\cos\theta)$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l r^{-1}\chi_l(r)P_l(\cos\theta) \tag{19.1}$$

ただし P_l は次数 l の Legendre の多項式で，χ_l は次の方程式を満たすものである．

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2}+\left[k^2-U(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l=0$$

$$k=\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}},\qquad U(r)=\frac{2\mu V(r)}{\hbar^2}\xrightarrow[r\to\infty]{}0 \tag{19.2}$$

$r=0$ での境界条件は R_l が有限であること，すなわち χ_l が零になることがあり，これによって（19.2）の解の漸近形は，任意定数がかかることを除いてはきまってしまう．

この漸近的な様子の一般的な性質をしらべるために，rが十分大きくて，方程式（19.2）でUおよび l の項が無視できるものと考えよう．この場合には方程式（19.2）の解は $e^{\pm ikr}$ の形のもののいずれかになる．もっとよい近似を得るために次のようにおく．

$$\chi_l(r)=A\exp\left[\int_a^r f(r')dr'\right]e^{\pm ikr} \tag{19.3}$$

ただし，Aおよびaは定数とする．〔(19.3) の〕最初の指数関数は，rの大きなところ

でゆっくり変化する関数であると仮定しておく．このことは，$f(r)$ が $r\to\infty$ に対して r^{-1} よりも，もっと急に減ってゆくことを意味する．(19.3) を (19.2) に代入すれば，f に対する次の方程式が得られる：

$$f'+f^2\pm 2ikf=U(r)+\frac{l(l+1)}{r^2}\equiv W(r) \qquad (19.4)$$

ただし，$'$ は r についての微分を表わす．ここで $W(r)$ は ($s>0$ として) 大きな r に対して r^{-s} と同じ減り方をするものとすれば，左辺の最後の項が主に利く項になり，f もまた r^{-s} と同じ減り方をすることになる．この場合，もしも $s>1$ ならば，r の大きなところで，χ_l は $e^{\pm ikr}$ のように変化することになる．というのは，そのときには (19.3) の方程式の exp. の中の積分は大きな r に対して，収斂するからである．一方，もしも W が指数関数的に，または誤差関数的に減るものとすれば（このことは同時に，$l=0$ を意味する），方程式 (19.4) の左辺で，第一項および第三項を共に考慮しなければならないことになる．しかしこのときも，χ_l はやはり $e^{\pm ikr}$ のように変化するということを示すのは困難ではない．クーロン場では r の大きなところで U および W は r^{-1} と同じように変化する．したがって，特別の注意を必要とする物理的に興味のある唯一の場合であるが，この場合については §21で議論することにしよう．

要するに，$\chi_l(r)$ の漸近形は全く一般的に次のように書き表わすことができる．

$$\chi_l(r) \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} A'_l \sin(kr+\delta'_l) \qquad (19.5)$$

ただし，これまでのところでは，A'_l および δ'_l は複素数でありうる．$r=0$ で零になる (19.2) の解は，ある定数をかけることを除いては一意的にきまる．この解は，k, U および l がすべて実数である以上，$r=0$ で実数値をとって出発しさえすればすべての点で実数であることを示すことができる．したがって，たとえ A'_l は実数である必要がないにしても，δ'_l は実数でなければならないことになる．このことが成り立っているとすれば，大きな球面を通過する粒子の半径方向の流束の全体は零となることが容易に証明できる．すなわち

$$\lim_{r\to\infty} 2\pi r^2 \int_0^\pi S_r \sin\theta d\theta = 0 \qquad (19.6)$$

ただし，S_r は方程式 (19.1) の $u(r,\theta)$ を (7.3) に代入して得られたベクトルの動径方向の成分である．このことは，考えている球の中に，粒子の流れの湧き口も吸い口も

なく，かつ半径方向に外部へ散乱されて出てゆく粒子は，入射平面波によって補われている，ということを意味している．

19-2　散乱の微分断面積

方程式（19.5）に表われている振幅 A'_l および位相角 δ'_l は，問題を幾分特定化した場合に即して定義し直しておく方が便利である．つまり，$U(r)$ はある距離 a より大きな r に対しては無視しうるものと仮定しよう；ただし，実際問題として興味のある場合で（19.2）の l の項が無視できない程度に a が小さいこともあり得る．そこで，r の領域を次の三つの区域に分けることができる．第一の区域では，$U(r)$ を無視することができなくて，R_l の形が U に関係してくる．第二の区域では，第二は $U(r)$ は無視できるが，l の項は無視できなくなっている領域である．そうすれば，いくつかの実数である $R_l(r)$（ただし複素定数の乗数因子があってもよいという可能性は別にして）の最も一般的な形は，次のようなものであることが§15で示されている．

$$R_l(r)=A_l[\cos\delta_l j_l(kr)-\sin\delta_l n_l(kr)] \tag{19.7}$$

ここで δ_l は実数である；第三の領域では，l を含む項が U と同様に無視しうるようになり，$R_l(r)$ は（15.8）の漸近公式から求められる．（15.8）に従えば，この R_l は次のような漸近形をもっている．

$$R_l(r)\xrightarrow[r\to\infty]{}(kr)^{-1}A_l\sin(kr-\tfrac{1}{2}l\pi+\delta_l) \tag{19.8}$$

方程式（19.5）と（19.8）は $A_l=kA_l'$ および $\delta_l=\delta_l'+\frac{1}{2}l\pi$ ととれば一致する．

ところで，（19.1）の漸近形を（18.10）と一致させたいわけである．それには，$e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta}$ の Legendre 多項式による展開式が必要になる[1)]：すなわち

$$e^{ikr\cos\theta}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta) \tag{19.9}$$

（19.9）の漸近形を $A=1$ とおいた（18.10）に代入して，その結果を（19.1）の漸近形に等しいとおけば次の等式が得られる．

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l(kr)^{-1}\sin(kr-\tfrac{1}{2}l\pi)P_l(\cos\theta)+r^{-1}f(\theta)e^{ikr}$$
$$=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^lA_l(kr)^{-1}\sin(kr-\tfrac{1}{2}l\pi+\delta_l)P_l(\cos\theta)$$

---

1) G. N. Watson, "Theory of Bessel Function" 改訂版 (Macmillan, New York, 1944) の p. 128 をみよ．

sin 関数を複素指数関数を使って書き換えると，この方程式の両辺の e^{ikr} と e^{-ikr} の係数がお互いに等しくなければならない：すなわち

$$2ikf(\theta)+\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l e^{-\frac{1}{2}il\pi}P_l(\cos\theta)$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l A_l e^{+i(\delta_l-\frac{1}{2}l\pi)}P_l(\cos\theta)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l e^{\frac{1}{2}il\pi}P_l(\cos\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l A_l e^{-i(\delta_l-\frac{1}{2}l\pi)}P_l(\cos\theta) \tag{19.10}$$

となる．これらの等式は θ のすべての値に対して正しく，しかも Legendre の多項式は互いに直交する．これらのことを使うと，方程式 (19.10) の第二の式は次のようになる．

$$A_l=e^{i\delta_l}$$

この関係を，(19.10) の最初の方程式に代入すれば，散乱振幅として次のものが得られる．

$$f(\theta)=(2ik)^{-1}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\theta) \tag{19.11}$$

したがって結局，微分断面積は

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)\right|^2 \tag{19.12}$$

となる．

ここで次のことを注意しておくのは有益である．すなわち，波動関数の漸近的の振舞いに基づいた (18.10)，(19.11) および (19.12) の方程式は，特殊相対性を考慮に入れた場合にもやはり成り立つということである．重心座標系での運動を取り扱っている限り，運動を相対座標の一つの関数 u によって記述することができるから，$\hbar k$ を相対運動量とすれば S_l を使ったここのやり方で散乱を規定することができる．このことは，ポテンシャル（という非相対論的なやり方）によって記述することのできない相互作用の場合にも正しいのである．

19-3 散乱の全断面積

全断面積は方程式 (19.12) を球面上で積分すれば得られる．Legendre の多項式の直交性を使えば，全断面積には l の異なった値を含んだ因子の積は含まれないことになる．すなわち，

$$\sigma=2\pi\int_0^\pi \sigma(\theta)\sin\theta d\theta=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \tag{19.13}$$

全断面積はまた，$f(0)$ と関係づけることもできる．Legendre 多項式の母関数（14.10）からすべての l に対して $P_l(1)=1$ ということが導かれる．したがって，方程式（19.11）で $\theta=0$ とおけば，次の関係が得られる．

$$f(0)=(2ik)^{-1}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)$$

そこで，この関係と方程式（19.13）とを比較すれば，次の式が成り立つことがわかる．

$$\sigma=\frac{2\pi}{ik}[f(0)-f^*(0)]=\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) \tag{19.14}$$

ただし，記号 Im は，次にくる表式の虚数部分を表わすものである．

方程式（19.14）の物理的な解釈は次のようなものである：散乱が起こる以上，σ に比例しただけの分の粒子は，入射ビームから除かれるわけである．したがって，入射ビームの強度は，散乱領域（$\theta\approx 0$）の背後では，その正面に比べて小さくなる．このことは，勿論（18.10）の漸近式の二つの項の干渉によってのみ起こり得ることである．一方，かかる干渉項は，前方散乱の振幅の一次関数であるべきだから，結局（19.14）という一般的な形の関係式が予想されるわけである．実際に，この干渉項を計算してみると，方程式（19.14）は，もっとはるかに一般的に成立することが示される：すなわち f が θ のみならず ϕ を含む場合，および σ が弾性散乱に限らず非弾性散乱および吸収を含む場合についても，この式は成立するのである（§20の末尾を参照のこと）．

19-4 位 相 の ず れ

角 δ_l は l 番目の部分波の**位相のずれ** *phase shift* とよばれている．というのは，（19.8）によればそれが実際の動径部分の波動関数 $R_l(r)$ の漸近形と散乱ポテンシャルのない（すなわち $U=0$）ときの動径部分の波動関数 $j_l(kr)$ の漸近形との位相の違いになっているからである．〔（19.12）または（19.13）からわかるように，〕位相のずれによって散乱は完全にきまり，かつ δ_l がすべてそれぞれ 0° か 180° の場合には散乱断面積は零になる．

ここで注意すべきことは，$U(r)$ が $1/r$ よりも早く小さくなってゆくのならば，上に仮定したような，それよりも大きい r について $U(r)$ が無視できるような半径 a

が存在するかどうかにかかわりなく，(19.11) の導き方は成立するということである．しかし，部分波の方法が一番有効なのは，このような a が実際に存在する場合，特に ka が1かまたはそれより小さいオーダーの場合である．この理由は，$j_l(kr)$ の最初の，最大の極値は大体 $r=l/k$ のところにあり，これよりずっと小さい r に対しては $j_l(kr)$ も小さくかつ大体 r^l 程度で増えてゆく（方程式 (15.7) を見よ）．したがって，もしも $a \ll l/k$ ならば U が無視できないところでは j_l は非常に小さいはずである；したがって，l 番目の部分波はポテンシャルによってほとんど影響をうけず，位相のずれ δ_l は非常に小さいことになり，この l 番目の部分波からの散乱に対する寄与は無視できるようになる．そこで，散乱断面積は $l=0$ から ka の程度の最大の l までの項の数列からなっていることがわかる．位相のずれを計算することは，通常面倒な仕事であるから，この方法が適用し易いためには ka が小さければ小さいほどよいわけである．こうして，この部分波の方法は衝突粒子のエネルギーが低い領域で最も有効になる．

古典力学で考えると，質量 μ，速度 v，角運動量 $l\hbar$ の自由粒子が原点に最も近づいたときの距離が $l\hbar/\mu v=l/k$ であるということは，上に述べたことに関連して注意すべきことである．というのは，このように考えると，上に述べた注意は古典的な粒子が十分大きな角運動量をもっていて $r<a$ のポテンシャルの領域に入り込まないならその粒子は散乱されないということに対応しているからである．

19-5 δ_l の 計 算

位相のずれ δ_l は，$r<a$ に対する動径の波動関数 $R_l(r)$ を外部の解 (19.7) とつなぐことによって計算される．この $R_l(r)$ は，何かまとまった解析的な形をとることもあるが，そうでない場合でも必要に応じて数値計算で求めることはいつでもできる．$r=a$ での境界条件は，$(1/R_l)(dR_l/dr)$ が連続ということである．したがって，γ_l を内部波動関数の傾斜のそれ自身の値に対する比とすれば次式が得られる．

$$\frac{k[j'_l(ka)\cos\delta_l - n'_l(ka)\sin\delta_l]}{j_l(ka)\cos\delta_l - n_l(ka)\sin\delta_l} = \gamma_l$$

ここで，微係数 j'_l, n'_l を (15.10) を使って書き直すことができて，結局 δ_l は

$$\tan\delta_l = \frac{kj'_l(ka) - \gamma_l j_l(ka)}{kn'_l(ka) - \gamma_l n_l(ka)} \tag{19.15}$$

で与えられる．

l が大きく，δ_l が小さいものと予想される場合には，方程式（19.15）をそのまま δ_l に対する近似式を求めるために用いることができる．この場合には，γ_l は散乱ポテンシャルのない場合の解の勾配と値との比と大して違いはないものと考えられるから，次のようにおくことができる．

$$\gamma_l = k\left[\frac{j'_l(ka)}{j_l(ka)} + \epsilon_l\right], \qquad |\epsilon_l| \ll \left|\frac{j'_l(ka)}{j_l(ka)}\right| \tag{19.16}$$

方程式（19.15）は，（15.9）を使って次のように書き直すことができる．

$$\tan \delta_l = \frac{\epsilon_l (ka)^2 j_l{}^2(ka)}{\epsilon_l (ka)^2 j_l(ka) n_l(ka) - 1} \tag{19.17}$$

ここまではまだ正確な式である．ここで $l \gg (ka)^2$ の場合には，（15.7）による j_l の羃級数展開を利用し，さらに n_l の大きさのオーダーをみつもるためには（15.7）と（15.8）を使うと，まず（19.16）の不等式は

$$|\epsilon_l| \ll \frac{l}{ka} \tag{19.18}$$

となり，（19.17）は，次のように近似することができることになる．

$$\delta_l \approx -\frac{\epsilon_l (ka)^{2l+2}}{[(2l+1)!!]^2} = -\frac{\epsilon_l 2^{2l}(l!)^2 (ka)^{2l+2}}{[(2l+1)!]^2} \tag{19.19}$$

方程式（19.18）は，（19.11）の中に出てくるような部分波についての和が，収斂することを証明するために用いることができる．l が大きいときの $\ln|\delta_l|$ での支配的な項をみつけるために，Stirling の公式を使い，$\ln l$ およびそれより低いオーダーの項を無視すると

$$\ln|\delta_l| \approx \ln|\epsilon_l| + 2l[\ln(ka) + 1 - \ln 2] - 2l \ln l$$

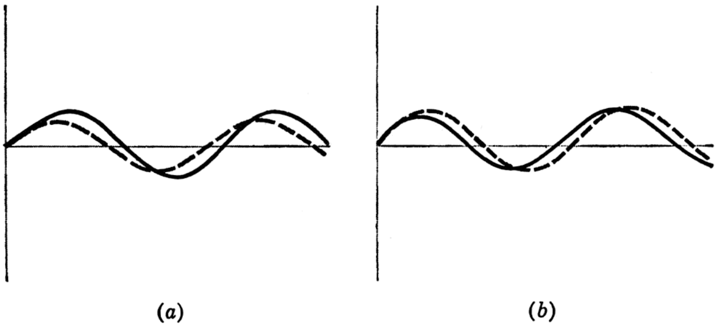
したがって，$|\epsilon_l|$ が（19.18）で示されている極大値をとるにしても，δ_l は l の階乗の逆数で（つまり指数関数よりずっと早く）小さくなってゆき，散乱の公式に表われる級数は十分早く収斂することになる．

19-6 δ_l と $V(r)$ の符号の関係

$l \gg (ka)^2$ のとき，δ_l が ϵ_l と反対の符号をもつことは，（19.19）から明らかである．もし今 V または U で表わされるポテンシャルの項が正であるとすれば，これは主として反撥的な力に対応し，（19.2）からわかるように動径方向の波動関数の曲率と関数値との

比は力が作用していない場合より正の方による傾向をもつことになる．このことは，$r=a$ での関数の傾斜と関数値との比が $U=0$ の場合の値よりも正の方によることを意味する．結局，ある斥力のポテンシャルは ϵ_l を正にし，δ_l を負にする．負の位相のずれは，動径方向の波動関数が力が作用していない場合の波動関数に比べて，外側に“押し出されている”ことを意味する．

同じようにして，負のポテンシャルは ϵ_l を負に，δ_l を正にすることがわかる．このことは，動径方向の波動関数が引力のポテンシャルによって“内側に引き込まれている”ことを意味する．

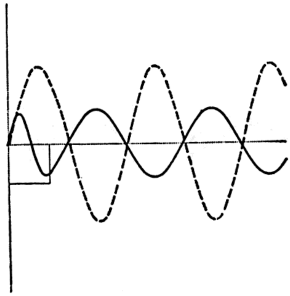


第22図　力のはたらかない場合の動径方向の波動関数 $rj_0(kr)$（点線）に対する，(*a*) 正の（斥力）ポテンシャルと (*b*) 負の（引力）ポテンシャルの効果を示すグラフ．実線は $\chi_0(r)$ を示す．（これらのグラフは J. L. Schwartz および H. M. Schey によって求められた．）

この結論を図によって示すには，$r=0$ で任意にとった $rj_0(kr)$ と $\chi_0(r)$ とを同じ傾斜をもって出発させて，それらのグラフを比較してみればよい．第22図 a および b はそれぞれ斥力および引力の角型ポテンシャルに対して行なった数値計算の結果を示している．単位は，$\hbar=1$，$m=\frac{1}{2}$ で長さの単位はグラフに現われている横座標の全長の五分の一になるように選ばれている．ポテンシャルは半径 $a=1$，強さ $V_0=\pm 2$ をもつ．エネルギーは $E=4$，したがって $ka=2$ になっている．いずれの場合でも，点線は $rj_0(kr)$ を，実線は $\chi_0(r)$ を表わしている．

19-7 Ramsauer-Townsend 効果

第22図 b の形から示唆されることは，引力のポテンシャルが十分強い場合には，半径方向の部分波がちょうど半週期だけ内側に引き込まれて，その位相の変化が180°になる場合がおこりうるということである．もしこういうことがおこれば，$f(\theta)$ の式（19.11）の中の対応する項は0となり，この部分波は散乱に寄与しないことになるはずである．この種の状況は第23図に示されている．このグラフは第22図と同様に数値計算の結果によるもので，$a=2$, $V_0=-5$ で $E=1$ したがって $ka=2$ ととってある．点線は $rj_0(kr)$，実線は $\chi_0(r)$ を表わし，ポテンシャルの幅も書き添えてある．



第23図 角井戸型ポテンシャルの引力が十分強く $\delta_0=180°$ になる場合の $rj_0(kr)$（点線）と $\chi_0(r)$（実線）のグラフ．2つの波動関数は $r=0$ で同じ傾斜をもって出発しており，$\chi_0(r)$ の方は半サイクルだけ引き込まれている．（これらのグラフは J. L. Schwartz と M. L. Schey によって与えられたものである．）

このような状況では，ka が十分小さくかつ引力ポテンシャルの大きさが十分大きくて，その結果 $\delta_0=180°$ で，他のすべての位相のずれは無視しうるほど小さいという場合が起こる可能性があることになる．そのような場合には，散乱波の振幅 $f(\theta)$ はすべての θ に対して零になり，散乱はおこらないことになる．これは，稀有気体の原子に約0.7電子ボルトのエネルギーの電子をぶっつけたときの散乱断面積に，極めて低い極小値が観測されるという，**Ramsauer-Townsend** 効果の説明になる．[1] というのは，

1）この説明は N. Bohr によって示唆されたものであるが，H. Faxén and J. Holtsmark, ***Zeits. f. Physik*, 45**, 307, (1927) によって定量的にも正しいことが示されている．

稀有気体の原子は完全に閉殻で構成されているから，その拡がりは比較的小さく，入射電子に作用する核と原子内電子の組み合わせによる力は強くかつその作用距離ははっきりしている．明らかに，この極小断面積はある一定のエネルギーで起こるはずである．というのは，ポテンシャル内部での波動関数の形は比較的低い入射エネルギーの衝突では，そのエネルギーによってほとんどかわらないのに反して，力が作用していないときの波動関数の位相はエネルギーによって著しくかわるからである．

物理的には，Ramsauer-Townsend 効果は稀有気体原子による電子の回折の一種とみなすこともできる．つまり，この場合電子の原子内での波動関数は，それが外部のゆがめられてない波動関数とちょうど滑らかにつながり合うようにゆがめられるわけである．また一方，この効果は前に考えた一次元の問題で，ある特定のエネルギーで完全な透過が起こるという現象とよく似ている（方程式（17.5）の議論を見よ）．ただし一次元の場合と事情が異なるのは，Ramsauer-Townsend 効果は斥力ポテンシャルの場合には起こり得ないということである．というのは，$\delta_0=-180°$ にするためには，ka は少なくとも 1 のオーダーでなくてはならず，このような大きな作用距離をもったポテンシャルは高い l に対する位相のずれをつくり出すはずだからである．

19-8 完全剛体球による散乱

部分波の方法の最初の例として，ある完全剛体球による散乱を計算してみよう．完全剛体球は $r<a$ に対しては $V(r)=+\infty$, $r>a$ に対しては $V(r)=0$ なるポテンシャルで表わされる．$r>a$ に対する解は，方程式（19.7）に他ならない．§8 で得られた，$u(a,\theta)=0$ という境界条件は，すべての動径方向の波動関数が $r=a$ で零になるという要請と同等である．したがって，この場合の位相のずれは（19.7）で与えられる $R_l(a)$ を零とおくか，または（19.15）の γ_l を無限大におくことによって得られるはずである：すなわち

$$\tan\delta_l=\frac{j_l(ka)}{n_l(ka)} \tag{19.20}$$

散乱の計算は，低エネルギーの極限の場合，すなわち $ka=2\pi a/\lambda\ll1$ のときには特に簡単になる．この場合には，（15.7）を（19.20）に代入すると位相のずれに対する近似式として次式が得られる．

$$\tan \delta_l \approx -\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)[(2l-1)!!]^2} \tag{19.21}$$

このように，δ_l は実際に l が増すとともに非常に急激に減少する．このことは（19.19）の一般論の結果と一致している．$k\to 0$ とすれば，すべての位相のずれは零になる；ただし，$l=0$ の部分波だけは（19.12）と（19.13）の中に現われる $1/k^2$ の因子のために散乱に対して有限な寄与を与えることになる．その結果

$$\sigma(\theta)\approx a^2, \qquad \sigma\approx 4\pi a^2 \tag{19.22}$$

となる．散乱は球対称であり，全断面積は古典論の値の 4 倍になっている．

高エネルギーの極限（$ka\gg 1$）では，古典論の値が得られるものと一応予想される．というのは，この場合には，散乱領域の大きさに比べて小さな波束をつくることが可能であり，この種の波束はほとんどひろがることなく古典的な軌道をたどるはずだからである．このことは，光または音の波動論で用いられる光線（または音線）の極限に対応している．〔この例では，〕散乱の微分断面積の方がどちらかというと求め難い．そこでただ，全断面積の中での支配的な項の求め方を示すだけにする．（19.20）を（19.13）に代入すると

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)j_l^2(ka)}{j_l^2(ka)+n_l^2(ka)} \tag{19.23}$$

となる．ここで，Bessel 関数の漸近形で，引数が大きくて，次数が引数より小さい場合，同じオーダーの場合，大きい場合にそれぞれ成り立つ漸近形[1)]を利用して計算すればよい．計算の結果，（19.23）の和に最も利くのは

$$l<(ka)-C(ka)^{\frac{1}{3}}$$

の部分であることがわかる．ただし，C は 1 のオーダーの数である；このときの主要な項は $\frac{1}{2}(ka)^2$ である．$(ka)-C(ka)^{\frac{1}{3}}<l<(ka)+C(ka)^{\frac{1}{3}}$，および $l>(ka)+C(ka)^{\frac{1}{3}}$ に対応する和の他の二つの部分からは，それぞれ $(ka)^{\frac{4}{3}}$ のオーダーの項の寄与がある．したがって高エネルギーの極限では無視しておいてよい．結局

$$\sigma\approx 2\pi a^2 \tag{19.24}$$

となり，この結果は古典論の値の 2 倍になっている．[2)]

1) Watson，前掲書，第 8 章参照．

2) 次の項は S. I. Rubinow and T. T. Wu, *J. Appl. Phys.* **27**, 1032 (1956) によって計算されている．その結果 $\sigma=2\pi a^2[1+0.99615/(ka)^{2/3}+\cdots]$

(19.24) のような一見奇妙な結果が得られた理由は，波動関数の漸近形が方程式 (18.10) できめられている以上，古典論の極限では散乱が二回勘定されていることになっているからである：つまり，一度は，本当の（古典論の散乱問題と同様に結果が球対称になっている）散乱として，今一度は前方に現われる散乱球の影としてである．この影の部分は入射平面波 e^{ikz} と散乱波 $f(\theta)e^{ikr}/r$ との干渉によって生じる（ただし (19.14) についての議論を参照のこと)．しかしながら，ka が有限であるかぎり，球を回って前方へ向っての回折は実際に起こり，（前方での強い極大値をも含むように観測が行ないうる限りは）測定される全断面積はほぼ $2\pi a^2$ になるわけである．

19-9 井戸型ポテンシャルによる散乱

部分波の方法の第二の例として，§15 の第13図に図示されているような，球対称の井戸型ポテンシャルによる散乱という，やや複雑な問題を考えることにしよう．$r=0$ で有限になっている内部（すなわち $r<a$）の波動関数は，方程式 (15.11)′ との類推でわかるように

$$R_l(r)=B_l j_l(\alpha r), \qquad \alpha=\left[\frac{2\mu(E+V_0)}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{19.25}$$

となる．したがって，位相のずれは方程式 (19.15) で与えられることになる．ただし，$r=a$ での l 番目の部分波の勾配と関数値との比は

$$\gamma_l=\frac{\alpha j'_l(\alpha a)}{j_l(\alpha a)} \tag{19.26}$$

となる．

低エネルギーの極限 ($ka\ll 1$) では，(15.7) を (19.15) に代入すると，始めの二つの位相のずれとして次式が得られる．

$$\begin{aligned}\tan\delta_0 &\approx -\frac{\gamma_0 ka^2}{1+\gamma_0 a}\\ \tan\delta_1 &\approx \frac{(ka)^3}{3}\frac{1-\gamma_1 a}{2+\gamma_1 a}\end{aligned} \tag{19.27}$$

$\gamma_0 a=-1$ または $\gamma_1 a=-2$ でない限り，これらはいずれも $k\to 0$ のとき零となる．しかしながら，剛体球の場合と同様に，$l=0$ の部分波は，(19.12) および (19.13) に現われる $1/k^2$ の因子のために散乱に対して有限な寄与を与えることになる．方程式 (19.26) からわかるように $\gamma_0 a=\alpha a\cot\alpha a-1$，したがって

$$\sigma \approx 4\pi a^2\left(1-\frac{\tan \alpha a}{\alpha a}\right)^2 \tag{19.28}$$

となり，散乱は球対称になっている．

以上の結果および前の剛体球の場合を考え合せて得られる結論，すなわち低エネルギーでの散乱は，実質的には衝突エネルギーおよび観測の角度に関係しないということは，有限な作用距離をもつ任意のポテンシャルについて，ほとんど常に正しいものである．方程式（19.27）の後で指摘しておいたように，γ_l のどれか一つが $\tan\delta_l$ の表式の分母を非常に小さくする値をとるときには，例外的な事情が起こり得る．このような事情が起こった場合には，l 番目の部分波が散乱ポテンシャルと**共鳴** *resonance* しているといわれる；この場合，通常その項が散乱を支配することになる．

19-10 共　鳴　散　乱

共鳴散乱の断面積に対する近似式は，α が $\alpha_0 \equiv (2\mu V_0/\hbar^2)^{1/2}$ に十分近い場合には，γ_l は α が増すにつれて，それに比例して減少するということを利用して求めることができる．α が大きくなってゆくと，内部波動関数は一層急激に曲げられることになり，その結果 $r=a$ での勾配と関数値との比は小さくなってゆく．今，k が小さいとすると

$$\alpha=(\alpha_0{}^2+k^2)^{\frac{1}{2}} \approx \alpha_0+\frac{k^2}{2\alpha_0}$$

となり，k についての最低次項までをとれば

$$\gamma_l a \approx \gamma_l{}^0 a - b_l(ka)^2$$

と書くことができる．ここで，$\gamma_l{}^0$ は $\alpha=\alpha_0$ に対する γ_l の値であり，b_l は1のオーダーの正の数である[1]．これを（19.27）に入れ，さらに（19.12）に代入してみれば，共鳴をおこしている部分波 l の値が0および1の二つの場合の各々について，微分断面積での支配的な項として次のものが得られる．

$$\sigma(\theta) \approx \frac{a^2}{(\zeta_0-b_0k^2a^2)^2+(ka)^2}, \qquad l=0 \tag{19.29}$$

$$\sigma(\theta) \approx \frac{9a^2\cos^2\theta(ka)^4}{(\zeta_1-b_1k^2a^2)^2+(ka)^6}, \qquad l=1 \tag{19.30}$$

---

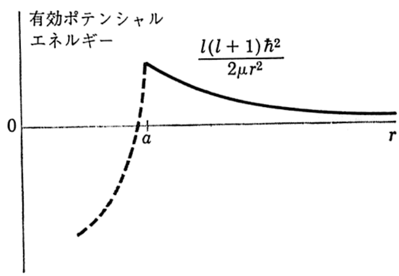
1)　$\gamma_l{}^0 a=-(l+1)$ のとにはき，零エネルギーの衝突で，l 番目の部分波がちょうど共鳴していることを証明することができる；このときには，すべての l について $b_l=\frac{1}{2}$ である．なお101頁の脚注1と比べてみよ．また次の文献を参照のこと；B. W. Downs, *Am. J. Phys.* **30**, 248 (1962).

ただし $\zeta_0=\gamma_0{}^0a+1$, $\zeta_1=\gamma_1{}^0a+2$ とおいてある；共鳴の場合には，$|\zeta_0|$ および $|\zeta_1|$ は1に比べて小さい．その場合，(19.29) は ka の単調減少関数であることは容易に示される．それに対して，(19.30) は ζ_1 が正のときは $ka\approx(\zeta_1/b_1)^{1/2}$ で鋭い極大値をとり，ζ_1 が負のときには $ka\approx(2|\zeta_1|b)^{1/4}$ で比較的低い極大値をとる．

もし $\zeta_0=\alpha_0 a\cot\alpha_0 a$ という関係を用いるならば，(19.29) から $l=0$ の部分波が共鳴している場合の，全断面積に対する手頃な一つの近似式として次の式が得られる．

$$\sigma\approx\frac{4\pi}{k^2+\alpha_0{}^2\cot^2\alpha_0 a} \tag{19.31}$$

明らかに，$l=0$ の部分波は低い衝突エネルギーでは，$\alpha_0 a$ が大体 $\pi/2$ の奇数倍，すなわち $V_0a^2\approx\pi^2\hbar^2/8\mu$, $9\pi^2\hbar^2/8\mu$ 等の場合には，いつでも共鳴しているわけである．方程式 (15.3) の議論からわかるように，これらの V_0a^2 の値は $l=0$ の新しいエネルギー準位が現われてくる値にちょうど当っている．ある（必ずしも角型とは限らぬ）ポテンシャルの穴が，零に極めて近いところに一つのエネルギー準位をもっていると，その準位と同じ（必ずしも零と限らぬ）値の l をもった粒子の低エネルギー散乱に際して共鳴を起こすということは，全く一般的に成立することなのである．物理的な見方をすれば，ちょうどポテンシャルによって束縛されるようなエネルギーに当る値のエネルギーをもって入射してくる粒子は，そこへ集中して，それが波動関数の大きなゆがみを生じ，



第24図 $l>0$ の場合の有効ポテンシャルエネルギー曲線 [$V(r)$+ “遠心力のポテンシャル”] ただし，V は $r>a$ では 0, $r<a$ の点線の部分は V の形による．($r\geq a$ での) 有効ポテンシャルの障壁は，第14図の箱型ポテンシャルの障壁に似ており，0を僅かに上回る E に対しては，小さな透過しか起こらない．

したがって大きな散乱を起こす傾向があるということができる．

ζ_1 が正で $l=1$ の場合，低エネルギー散乱に際して鋭い共鳴極大が起こることが上の議論でわかったが，これと同じような共鳴現象は，$l=0$ 以外の任意の値の l に対しても起こりうるものなのである．ただし，それにはポテンシャルが，その角運動量をもつ新しいエネルギー準位を含みうるために十分な深さまたは幅をもっていないことが必要である．(このことは，井戸型ポテンシャルの場合には，ζ_l が小さくかつ正であることに対応している)．物理的には，このようなポテンシャルが，零よりは僅かに上に，一つの**仮想的なエネルギー準位** *virtual energy level* を含んでいるものと考えることができる．勿論，正のエネルギーをもった，離散的エネルギー準位というものは存在し得ないのであるが，$l>0$ の場合には $l(l+1)\hbar^2/2\mu r^2$ の正の "遠心力のポテンシャル" (方程式 (14.18) の議論を見よ)．が，ちょうど，仮想的エネルギー準位にある粒子が逃げてゆくのを防ぐポテンシャル障壁の役割をするのである．第24図に，この種の障壁を図で示してある．この障壁の特徴は，低エネルギーにおいては小さな透過しか起こらないことで，この点は第14図の〔箱型ポテンシャルの〕障壁と同様である．(方程式 (17.7) についての議論を見よ)．要するに，仮想的な準位というものは，一種の過渡的な存在ではあるが，その準位のエネルギーで入射する波動関数に対しては，その近傍のエネルギーに比して，はるかに大きな歪みをあたえるのである．零エネルギーの極限では，遠心力の障壁の透過は零になることが証明できる (§34を見よ)．したがって $l>0$ の場合には粒子は外へしみ出すことができないわけである．結局，零エネルギーでの共鳴は，l が零でない場合には真の束縛状態を生じることになる．

19-11　低エネルギーの角分布

衝突エネルギーが小さいが零ではないというときには，$l=1$ の部分波が散乱に対して測定しうる効果を与えることがある．もし δ_0 と δ_1 だけが，かなり零と違った値をとるならば，方程式 (19.12) と (19.13) は次のようになる．

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{k^2}[\sin^2\delta_0+6\sin\delta_0\sin\delta_1\cos(\delta_1-\delta_0)\cos\theta+9\sin^2\delta_1\cos^2\theta]$$

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}(\sin^2\delta_0+3\sin^2\delta_1) \qquad (19.32)$$

共鳴がない場合には，方程式 (19.27) と (19.32) から，$l=1$ と $l=0$ の部分波が全断

面積に寄与する割合の比は $(ka)^4$ のオーダーである．しかし，この微分断面積の中で最も大きな，角を含む項（これは $\cos\theta$ に比例している）の定数項に対する比は $(ka)^2$ のオーダーである．

したがって，$l=1$ の部分波はそれが全断面積に利いてくるエネルギーよりも，低いエネルギーで散乱の角分布に対して大きな意味をもっているといえる；これは，$l=1$ よりもっと強い $l=0$ の部分波との干渉のためである．たとえば，もしある特定の衝突エネルギーで $\delta_0=20°$ かつ $\delta_1=2°$ であるとすれば，$l=1$ の部分波は全断面積に対してはその3％を寄与するにすぎないが，一方では前方散乱（$\theta=0°$）を後方散乱（$\theta=180°$）の3.5倍にする役割をもっているわけである．

20□複素ポテンシャルによる散乱

これまでの所では，ポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{r})$ は実の量であると仮定されてきている．Vが方程式（6.14）に従って古典力学からとってこられている以上，このことは自然な仮定である．しかしながら，もっとはるかに複雑な物理系の一つの極めて短縮された記述として，複素ポテンシャルを利用するのが便利であるような状況も幾つか存在するのである．たとえば，中性子が原子核によって弾性的にまたは非弾性的に散乱されるとする．最初の弾性散乱の場合には，原子核は元の状態のままで残されていて，中性子と原子核との運動エネルギーの和は衝突の前後で同一になっている．非弾性散乱の場合には，原子核はある励起状態に残され，（18.5）の方程式に関連して定義されている量Qは負になる．中性子の非弾性散乱や吸収という過程は，いづれも中性子が入射ビーム中から取り除かれ散乱振幅 $f(\theta,\phi)$ の一部として再び現われることのない過程になっている．

弾性散乱に対するそれ以外のこの種の過程の効果を問題にする限りでは，中性子と原子核との相互作用を複素ポテンシャルで表現されるものと見なすことは，一つの便利な近似になるのである[1]．この種のポテンシャルは通常**光学模型ポテンシャル** *optical-*

1) 最初にこの種の目的に複素ポテンシャルを利用したのは H. Feshbach, C. E. Porter and V. F. Weisskopf, *Phys. Rev.* **96**, 448 (1954) である．この問題の総合報告としては次のものを見よ：P. E. Hodgson "The Optical Model of Elastic Scattering" (Oxford, New York, 1963)；"Advances in Theoretical Physics" (Academic, New York, 1965) 中の A. L. Fetter and K. M. Watson の報告．

model potential とよばれているが，それは光を部分的に吸収する媒質の光学的諸性質の議論のために古くから利用されてきている複素屈折率との類比によるものである．この節では，Vが複素量であってもよいとする仮定によって，これまで説明してきた理論において必要になる幾つかの修正点について述べることにする．

20-1　確 率 の 保 存

§7で証明したように，(7.1) および (7.2) の方程式で定義された位置の確率密度 $P(\mathbf{r},t)$ および確率の流れの密度 $\mathbf{S}(\mathbf{r},t)$ は微分的な保存の関係式に従う．この関係を導くに当って，Vが実数であるという仮定が本質的な役割を果していた．ここではVは複素数であると仮定し，かつ今後の議論に都合のよいようにそれを V_R および V_I を実数として，次の形に書いておくことにする．

$$V=V_R-iV_I$$

§7の保存の関係式を導く筋道を繰り返してみればわかるように，保存式の代わりに次の関係が得られる．

$$\frac{\partial P(\mathbf{r},t)}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{S}(\mathbf{r},\ t)=-\frac{2V_I}{\hbar}P(\mathbf{r},t) \tag{20.1}$$

P は負にはならないから，この方程式の右辺は V_I が正ならば確率の湧源の，V_I が負であれば確率の吸込みの作用をする．上に論じた物理的理由から以下の話では常に $V_I\geq 0$ であると仮定することにしよう．もしも $\nabla\cdot\mathbf{S}=0$ となる領域が存在すれば，(20.1) からわかるようにそこではPが時間と共に指数関数的に減少してゆく，つまり $P\propto e^{-2V_It/\hbar}$ で，その結果波動関数としては時間について $\psi\propto e^{(-iE-V_I)t/\hbar}$ という形をもつことが予想される．

方程式 (20.1) を曲面 A を境界面とするある固定された体積 Ω にわたって積分すれば方程式 (7.4) の代わりに次式が導かれる

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega P(\mathbf{r},t)d^3r=-\int_A S_n dA-\frac{2}{\hbar}\int_\Omega V_I P d^3r \tag{20.2}$$

Ω を全空間にとったとき右辺の表面積分が零になるように，ψ が遠距離で十分よい有界性をもつとすれば，規格化積分は時間とともに減少することがわかる．このことは，幾つかの粒子が吸収されていく以上当然予想されるべきことである．

より興味があるのは，(20.2) の方程式を散乱の起こっている状況に適用してみ

ることである．この場合には ψ が定常的であることを要請する．つまり ψ は時間については $\psi \propto e^{-iEt/\hbar}$ という形をもつことになる．そうすると，(20.1) の方程式の議論からわかるように，$V_I \neq 0$ でかつ $\nabla \cdot \mathbf{S}=0$ という領域は存在しないことになる．すると方程式 (20.2) で左辺はこの場合零で，右辺の第一項 $-\int_A S_n dA$ は Ω が大きくなるにつれて，ごく遠方から Ω に流れこんでくる粒子の内向きの流束全部になってゆく．ところで，(19.6) についての議論の際に指摘しておいたように，この積分が零になるということは，外向きに散乱されてゆく粒子が入射平面波によって丁度補われていることを意味していた．したがって今ここで問題にしている状況では，ψ が無限遠で単位の振幅をもつ平面波を表わすように規格化されているとすれば，この表面積分は入射波プラス弾性散乱波から複素ポテンシャルによって取り除かれた粒子の流束になっていることがわかる．したがって，それは，v を相対速度，$\sigma_{\rm abs}$ を吸収および非弾性散乱の全断面積の和とすれば，$v\sigma_{\rm abs}$ とおいてよいことになる．結局次の関係が得られる．

$$\sigma_{\rm abs}=\frac{2}{\hbar v}\int V_I|\psi|^2 d^3r \tag{20.3}$$

ψ が適当に規格化されている限りこの方程式が成り立つことは事実であるが，それが $\sigma_{\rm abs}$ の計算に利用できるのは $V_I \neq 0$ の領域内での ψ が既知である場合だけに限られる．

20-2 複素位相のずれ

ポテンシャルが球対称であれば V が複素量であるなしにかかわらず部分波の方法を利用することができる．(19.5) の方程式の議論からわかるように，ポテンシャルが実数であれば位相のずれも実数であった．同種の議論から V が複素量であれば δ_l は一般的に複素数になることがわかる．そこで α_l および β_l を実数として，

$$\delta_l=\alpha_l+i\beta_l$$

とおき，さらに

$$S_l \equiv e^{2i\delta_l}=e^{2i\alpha_l-2\beta_l}$$

で S_l を定義する．散乱振幅の表式の導き方は前と同じでよく，その結果 (19.11) の方程式に当るものは，

$$f(\theta)=(2ik)^{-1}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l-1)P_l(\cos\theta) \tag{20.4}$$

となる．弾性散乱の微分断面積は $|f(\theta)|^2$ であり，同じ過程の全断面は

$$\begin{aligned}\sigma_{el}&=2\pi\int_0^{\pi}|f(\theta)|^2\sin\theta d\theta\\&=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-2e^{-2\beta_l}\cos 2\alpha_l+e^{-4\beta_l})\\&=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1-S_l|^2\end{aligned}\tag{20.5}$$

$\beta_l=0$ とすれば予想通りこの式は（19.13）に戻る．

吸収断面積もやはり位相のずれを使って表わすことができる．この断面積は，先に指摘したように $-v^{-1}\int_A S_n dA$ という面積分に等しい．ただし，ここでは曲面 A として半径 r の大きな球面を選んでおくのが便利である：そうすると

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{abs}}&=-\frac{1}{v}\lim_{r\to\infty}r^2\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}S_r\sin\theta d\theta d\phi\\&=-\frac{1}{v}\lim_{r\to\infty}2\pi r^2\int_0^{\pi}S_r\sin\theta d\theta\end{aligned}\tag{20.6}$$

動径方向の流束 S_r は

$$S_r=\frac{\hbar}{2i\mu}\left(u^*\frac{\partial u}{\partial r}-\frac{\partial u^*}{\partial r}u\right)$$

であるが，$\partial u/\partial r$ としては（19.1）を微分して

$$\frac{\partial u}{\partial r}=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{r}\frac{\partial\chi_l}{\partial r}P_l(\cos\theta)+O\left(\frac{1}{r^2}\right)$$

となるので，結局（20.6）は

$$\sigma_{\text{abs}}=\frac{2\pi i}{k}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{2l+1}\left(\chi_l^*\frac{\partial\chi_l}{\partial r}-\frac{\partial\chi_l^*}{\partial r}\chi_l\right)$$

と書けることになる．ただし，右辺の表式は $r=\infty$ でとられたその漸近値を表わす．

（19.8）の漸近形を使ってわかるように

$$\begin{aligned}&\left(\chi_l^*\frac{\partial\chi_l}{\partial r}-\frac{\partial\chi_l^*}{\partial r}\chi_l\right)\xrightarrow[r\to\infty]{}\\&\qquad\frac{|A_l|^2}{k}[\sin(kr-\tfrac{1}{2}l\pi+\alpha_l-i\beta_l)\cos(kr-\tfrac{1}{2}l\pi+\alpha_l+i\beta_l)\\&\qquad-\cos(kr-\tfrac{1}{2}l\pi+\alpha_l-i\beta_l)\sin(kr-\tfrac{1}{2}l\pi+\alpha_l+i\beta_l)]\\&\qquad=\frac{|A_l|^2}{k}\sin(-2i\beta_l)\end{aligned}$$

$$=-\frac{i|A_l|^2}{k}\sinh 2\beta_l$$

この結果と $|A_l|^2=(2l+1)^2e^{-2\beta_l}$ の関係を（20.7）に代入すると

$$\sigma_{\rm abs}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-e^{-4\beta_l})$$

$$=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-|S_l|^2) \tag{20.8}$$

となる．この結果から $\beta_l\geq 0$ が予想される．

全断面積は弾性散乱の断面積と吸収断面積との和であると定義される．したがって（20.5）と（20.8）の方程式から全断面積 $\sigma_{\rm tot}$ は

$$\sigma_{\rm tot}=\frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-e^{-2\beta_l}\cos 2\alpha_l)$$

$$=\frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[1-{\rm Re}(S_l)] \tag{20.9}$$

ただし，記号 Re は次にくる表式の実数部分を表わす．

20-3 漸近的な関係

散乱波動関数の漸近的な振舞いを考察することによって，興味深くかつ有用な三つの関係，すなわち相反定理，一般化された光学定理および光学定理を導き出すことができる．ここではこれらの三つの定理をたったいま挙げた順序で求めてゆくことにする．ただしこの順序は歴史的な順序にはなっていない[1]．

方程式（18.10）で $A=1$ として，それを z 軸が果している特別の役割を強調しない次のような形に書き直しておくのが便利である．

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\xrightarrow[r\to\infty]{}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})+r^{-1}f(\mathbf{k}_r,\mathbf{k})e^{ikr} \tag{20.10}$$

こうすれば平面波は $\mathbf{k}$ の方向に沿って入射しており，振 $f(\mathbf{k}_r,\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ から $\mathbf{k}_r$ への散乱に対応している．ただし，$\mathbf{k}_r$ は k の大きさと $\mathbf{r}$ の方向をもつ一つのベクトルであ

1） 光学定理〔すなわち以下の方程式（20.23）〕が歴史的には最も早く以下に述べるやり方で E. Feenberg, *Phys. Rev.* **40**, 40 (1932) によって導かれた．その後この取り扱い方を一般化して，他の二つの定理を与えるようにしたのは R. Glauber and V. Schomaker, *Phys. Rev.* **89**, 667 (1953) による．

る．入射方向 $\mathbf{k}'$ に対応するもう一つの解に対しては

$$u_{-\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} \exp(-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r})+r^{-1}f(\mathbf{k}_r, -\mathbf{k}')e^{ikr} \tag{20.11}$$

となる．$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ および $u_{-\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$ はいづれも E の同じ値をもつ方程式（18.8）を満足するから，V が実数かまたは複素数かにかかわらず

$$u_{-\mathbf{k}'}\nabla^2 u_{\mathbf{k}}-u_{\mathbf{k}}\nabla^2 u_{-\mathbf{k}'}=0 \tag{20.12}$$

が成立することになる．

方程式（20.12）を半径 r の大きな球状体積について積分してみることができ，さらにこの体積々分をこの球の表面についての表面積分に変形することができる：

$$\int_\Omega (u_{-\mathbf{k}'}\nabla^2 u_{\mathbf{k}}-u_{\mathbf{k}}\nabla^2 u_{-\mathbf{k}'})d^3r$$

$$=r^2\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left(u_{-\mathbf{k}'}\frac{\partial u_{\mathbf{k}}}{\partial r}-u_{\mathbf{k}}\frac{\partial u_{-\mathbf{k}'}}{\partial r}\right)\sin\theta_r d\theta_r d\phi_r=0$$

ただし，θ_r, ϕ_r はある任意に選ばれた極軸に関しての $\mathbf{r}$ の極角座標である．ここで（20.10）および（20.11）の漸近形を代入して r が大きいという極限をとってやれば次式が得られる．

$$r^2\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left\{ik(\cos\theta+\cos\theta')e^{ikr(\cos\theta-\cos\theta')}\right.$$

$$+\left[\frac{ik}{r}(1+\cos\theta')-\frac{1}{r^2}\right]f(\mathbf{k}_r,\mathbf{k})e^{ikr(1-\cos\theta')}$$

$$\left.-\left[\frac{ik}{r}(1-\cos\theta)-\frac{1}{r^2}\right]f(\mathbf{k}_r,-\mathbf{k}')e^{ikr(1+\cos\theta)}\right\}\sin\theta_r d\theta_r d\phi_r=0$$

ただし，θ は $\mathbf{k}$ と $\mathbf{r}$ との間の角で，θ' は $\mathbf{k}'$ と $\mathbf{r}$ との間の角である．被積分関数中の第一項は，$\mathbf{r}$ の方向についての積分にあたって一組の角 θ, θ' のどの組に対してもそれを打ち消す $\pi-\theta'$, $\pi-\theta$ という一組が存在することから，零になることを示すことができる．被積分関数中の $1/r^2$ の項も，（20.10）の展開で無視されていた他の $1/r^2$ のオーダーの項と同様，以下の（20.14）についての議論から明らかになるはずの理由によって無視することができる．

結局，残された項について方程式は次のようになる．

$$ikr\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}[(1+\cos\theta')f(\mathbf{k}_r,\mathbf{k})e^{ikr(1-\cos\theta')}$$

$$-(1-\cos\theta)f(\mathbf{k}_r,-\mathbf{k}')e^{ikr(1+\cos\theta)}]\sin\theta_r d\theta_r d\phi_r=0 \tag{20.13}$$

ただし左辺の積分は $r\to\infty$ の極限において評価されるべきものである．第一項において極軸を元の任意に選ばれた方向から $\mathbf{k}'$ の方向へ移し，それに応じて積分変数 θ_r, ϕ_r を θ', ϕ' で置き換えることができる．次に $w\equiv\cos\theta', F(w,\phi')\equiv ik(1+w)f(\mathbf{k}_r, \mathbf{k})$ とおいて積分

$$r\int_{-1}^{1} F(w,\phi')e^{ikr(1-w)}dw \tag{20.14}$$

を r を大くしていった極限で考えよう．一回部分積分をした結果は

$$\frac{i}{k}F(w,\phi')e^{ikr(1-w)}\Big|_{-1}^{1}-\frac{i}{k}\int_{-1}^{1}\frac{\partial F}{\partial w}e^{ikr(1-w)}dw$$

となるが，明らかにさらに部分積分を行なってゆけば，r の高い冪が逐次に分母に現われることになる．したがって $r\to\infty$ の極限では第一項だけをとっておけばよいことになる．これは前に指摘しておいた $1/r^2$ のオーダーの項が無視できた理由である．結局，(20.14) の極限は次のものになることがわかる．

$$\frac{i}{k}[F(1,\phi')-F(-1,\phi')e^{2ikr}] \tag{20.15}$$

先の $F(w,\phi')$ の定義式から，$F(-1,\phi')=0$ であることがわかる．しかしながら (20.15) の第二項で，e^{2ikr} という因子は $r\to\infty$ に応じて零の周辺で振動する以上，この項はどんな場合にも落しておくことができたはずのものである．このことは，積分の漸近形式を求める際にしばしば利用されている定常位相の方法[1]の一つの応用に他ならない．今の場合，$w=1$ は**定常位相の点** *stationary phase point* とよばれる．それは，(20.14) の被積分関数の位相が w が 1 に近づくとき定常的になるからである．

20-4 相 反 定 理

(20.13) の第一項の定常位相点は $\cos\theta'=1$ すなわち $\theta'=0$ である．これは $\mathbf{r}$ が $\mathbf{k}'$ の方向をもつこと，すなわち散乱振幅 $f(\mathbf{k}_r, \mathbf{k})$ において $\mathbf{k}_r$ を $\mathbf{k}'$ で置き換えることに対応する．さらに，被積分関数は ϕ' に関係していない．したがって ϕ' についての積分は 2π という乗数因子を導入するだけである．同様に，(20.13) の第二項は $\cos\theta=-1$ すなわち $\theta=\pi$ に定常位相点をもち，その結果 $f(\mathbf{k}_r, -\mathbf{k}')$ において $\mathbf{k}_r$ は $-\mathbf{k}'$ で置き換えられることになる．

---

1) たとえば，C. Eckart, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 399 (1948) を見よ。

結局，次の**相反定理** *reciprocity theorem* を得る．

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = f(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}') \tag{20.16}$$

つまり，$\mathbf{k}$ から $\mathbf{k}'$ への散乱過程に対する振幅は終状態の方向を逆転した $-\mathbf{k}'$ から始状態の方向を逆転した $-\mathbf{k}$ への散乱過程の振幅に等しい，ということである．この定理はVが実数または複素数であろうと正しいことに注意しておくことが重要である．

$V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$ すなわちVが空間反転の対称性（第29節を見よ）．をもつ場合がしばしばある．その場合，散乱問題におけるすべてのベクトルは物理的な状況を変えることなく方向を逆転することが許され，その結果

$$f(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}') = f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tag{20.17}$$

となる．(20.16) と (20.17) とを組み合わせると，次のようないささか制限された相反定理が得られる．

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tag{20.18}$$

20-5　一般化された光学定理

先の§20-3，§20-4 でたどってきた同じ手順を，今度は $u_{-\mathbf{k}'}$ の代わりに $u_{\mathbf{k}'}{}^*$ から出発して繰り返すことができる．そうすれば (20.12) の方程式の代わりに次の方程式が得られる．

$$u_{\mathbf{k}'}{}^*\nabla^2 u_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}}\nabla^2 u_{\mathbf{k}'}{}^* + \frac{4i\mu}{\hbar^2}V_I u_{\mathbf{k}'}{}^* u_{\mathbf{k}} = 0$$

この方程式を半径 r の大きな球状体積について積分してやれば次の関係が導かれる．

$$r^2\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left(u_{\mathbf{k}'}{}^*\frac{\partial u_{\mathbf{k}}}{\partial r} - u_{\mathbf{k}}\frac{\partial u_{\mathbf{k}'}{}^*}{\partial r}\right)\sin\theta_r d\theta_r d\phi_r + \frac{4i\mu}{\hbar^2}\int_\Omega V_I u_{\mathbf{k}'}{}^* u_{\mathbf{k}} d^3r = 0$$

ここで，第一項に (20.10) の類いの漸近形を代入してやれば，rを大きくした極限における次の関係が与えられる．

$$r^2\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\Big\{ik(\cos\theta + \cos\theta')e^{ikr(\cos\theta - \cos\theta')} + \left[\frac{ik}{r}(1+\cos\theta') - \frac{1}{r^2}\right]f(\mathbf{k}_r, \mathbf{k})e^{ikr(1-\cos\theta')}$$

$$+\left[\frac{ik}{r}(1+\cos\theta)+\frac{1}{r^2}\right]f^*(\mathbf{k}_r,\mathbf{k}')e^{-ikr(1-\cos\theta)}$$

$$+\frac{2ik}{r^2}f^*(\mathbf{k}_r,\mathbf{k}')f(\mathbf{k}_r,\mathbf{k})\Big\}\sin\theta_r d\theta_r d\phi_r$$

$$+\frac{4i\mu}{\hbar^2}\int V_I u_{\mathbf{k}'}{}^* u_{\mathbf{k}} d^3r=0 \tag{20.19}$$

ただし最後の体積々分はここでは全空間についてとることになる．

前と同様に，第一項の積分は零になり，$1/r^2$ と指数関数の積になっている項はやはり無視できることになる．残りの二つの指数関数の項は定常位相の方法で評価することができる．第一項の定常位相点は前と同じ場所 $\cos\theta'=1$，すなわち $\mathbf{k}_r=\mathbf{k}'$．ところが第二項の定常位相点は今度は $\cos\theta=1$ になる，つまり前のように $\mathbf{k}_r=-\mathbf{k}$ ではなくて $\mathbf{k}_r=\mathbf{k}$ となる．それ以外に，指数因子の異なった符号から生じる符号の変更が一箇所あって，結局方程式 (20.19) は次の形になる．

$$-4\pi f(\mathbf{k}',\mathbf{k})+4\pi f^*(\mathbf{k},\mathbf{k}')+2ik\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} f^*(\mathbf{k}_r,\mathbf{k}')f(\mathbf{k}_r,\mathbf{k})\sin\theta_r d\theta_r d\phi_r$$

$$+\frac{4i\mu}{\hbar^2}\int V_I u_{\mathbf{k}'}{}^*, u_{\mathbf{k}} d^3r=0 \tag{20.20}$$

このままでは，この関係は利用し易いものではない．というのは最後の項はその評価が難しくかつ一般に簡単な物理的解釈をもたないからである．そこでまず第一に，Vが実数すなわち $V_I=0$ の場合を考える．その場合の (20.20) の方程式は一般化された**光学定理** *generalized optical theorem*. とよばれている次の関係になる．

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} f^*(\mathbf{k}_r,\mathbf{k}')f(\mathbf{k}_r,\mathbf{k})\sin\theta_r d\theta_r d\phi_r$$

$$=\frac{2\pi i}{k}[f^*(\mathbf{k},\mathbf{k}')-f(\mathbf{k}',\mathbf{k})] \tag{20.21}$$

V が空間反転の対称性をもつ場合には，方程式 (20.18) を利用してこの関係を簡単化することができて

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} f^*(\mathbf{k}',\mathbf{k}_r)f(\mathbf{k}_r,\mathbf{k})\sin\theta_r d\theta_r d\phi_r=\frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}[f(\mathbf{k}',\mathbf{k})] \tag{20.22}$$

となる．ここで注意すべき重要なことは，(20.21) および (20.22) の方程式は V が実数である場合に限って正しいということである．

(20.22) の方程式は，それを Born 近似（§38を見よ）．と結びつけて，次のよう

なやり方で利用することができる．Born 近似は散乱振幅 f に対する一つの極めて簡単な近似式で，V について 1 次のオーダーになっている．V が実数であればこの f は実数である．したがって（20.22）を使って V について最低次のオーダーでの f の虚数部分を計算することができ，計算の結果それが実際には 2 次のオーダーのものであることがわかる．

20-6 光 学 定 理

（20.20）の最後の体積々分が簡単な物理的解釈をもつようになる状況が一つある．それは $\mathbf{k}'=\mathbf{k}$ という場合である．この場合，$u_\mathbf{k}$ の規格化は以前に ψ に対して用いられた規格化と一致している以上（20.3）に従って

$$\int V_I u_\mathbf{k}{}^* u_\mathbf{k} d^3r=\tfrac{1}{2}\hbar v\sigma_{\mathrm{abs}}$$

である．このときの（20.20）は

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}|f(\mathbf{k}_r,\mathbf{k})|^2\sin\theta_r d\theta_r d\phi_r+\sigma_{\mathrm{abs}}=\frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\,[f(\mathbf{k},\mathbf{k})]$$

となる．左辺の第一項は弾性散乱の全断面積 σ_{el} に他ならないから，左辺は σ_{tot} に等しいことになる．

結局，次の**光学定理** *optical theorem* が得られる．

$$\sigma_{\mathrm{tot}}=\sigma_{\mathrm{el}}+\sigma_{\mathrm{abs}}=\frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\,[f(\mathbf{k},\mathbf{k})] \tag{20.23}$$

この結果は，それが V が球対称でない場合にもまた実数でない場合にも応用が利くという点で方程式（19.14）の一つの一般化になっている．実際には，光学定理はポテンシャルというものに無関係に導いてくることができるものである以上，すぐ上の文章で指定されているよりもずっと一般的にこの定理は成り立つのである．必要なことといえば（20.10）を（7.3）に代入して得られる確率の流れの密度 $\mathbf{S}(\mathbf{r},t)$ の漸近形だけである．この漸近形が成り立つ限り，$\mathbf{S}(\mathbf{r},t)$ の動径成分の無限に大きい球面上での積分は平面波プラス散乱波から粒子が消失している割合に比例しており，したがってそれは σ_{abs} に比例することになる．ここで定常位相の方法を適用してやれば（20.23）の方程式が直ちに導かれるのである．また光学定理は特殊相対性を考慮に入れた場合にも成り立つ．

$f(\mathbf{k},\mathbf{k})$ が光学定理に入ってきているのは，（20.10）の平面波と球面波との間

の干渉によるものであることは明らかである．この干渉の特徴は $e^{ikr(1-\cos\theta)}$ という位相因子に現われている．つまりこの因子は θ の関数としては $\theta=0$ の近傍を除けば r の大きいところで零の回りで急速な振動を示している．要するに漸近領域での確率の流れの密度は，あらゆる場所で $\mathbf{k}$ の方向をもつ平面波だけからくる部分と常に外向きの動径方向をもち，積分すれば σ_{el} になる散乱波だけからくる部分と干渉によって生じる部分とから構成されているわけである．この最後の部分が利いてくるのは $kr(1-\cos\theta)\lesssim 1$ の場合に限られる．kr が大きく θ が小さいときにはこの条件は $\theta\lesssim(kr)^{-1/2}$ に同等である．この角度の領域以内では散乱波は平面波とマイナスの干渉をしており，その結果無限に小さい角度を除いたすべての角度での吸収と非弾性散乱，さらに弾性散乱を丁度説明するに足るだけの入射流束の部分を平面波から差し引いていることになっているわけである．

漸近領域での，この種の干渉が起こっている角度の領域がその散乱体によって投じられる影のごく小部分をつくっていると考えてもよい．この小部分の影は $d\sim r(kr)^{-1/2}\sim(r/k)^{1/2}$ 程度の直径をもっている．真の影はある距離 r_s 以上に拡がることはできない．この距離は前方に散乱される振幅の干渉する部分すなわち虚数部分 $\mathrm{Im}[f(\mathbf{k},\mathbf{k})]/r_s$ が平面波の振幅のオーダーつまり1程度になっているような拡がりで，したがって $r_s\sim\mathrm{Im}[f(\mathbf{k},\mathbf{k})]\sim k\sigma_{\text{tot}}$．この限界の距離での影の直径は $d\sim(r_s/k)^{1/2}\sim(\sigma_{\text{tot}})^{1/2}$ になる．ところで σ_{tot} は短波長極限つまり古典論の極限では散乱体の直径の2乗のオーダーである．結局，影が存在する限界の距離では散乱体と影とは，期待通りに大体同じオーダーの大きさになっている[1]．

21□クーロン場による散乱

§19で注意したようにクーロン場は部分波の方法の応用に関する限り例外的な散乱体である．もし荷重 Ze および $Z'e$ の粒子間の衝突に対して $V(r)=ZZ'e^2/r$ とすれば，方程式 (19.3) は漸近的に次のようになることは容易にわかる．

$$\chi_l(r)\propto e^{\pm i(kr-n\ln|r)} \tag{21.1}$$

---

1) このパラグラフでの議論の拡大とその不確定性原理との関係については，L. I. Schiff, *Prog. Theor. Phys.* (Kyoto) **11**., 288 (1954) を見よ．

ここで，$n=\mu ZZ'e^2/\hbar^2k=ZZ'e^2/\hbar v$ で v は相対速度，μ は換算質量である．このように，非常な遠方での位相に対しても無視できないような対数の形の項がついているため，動径方向の解は周期関数的な形の自由粒子の解に近づいてゆかない．というものの，（以下で示すように）この散乱問題の解を球面座標で求めることはできる．また，§19 で導入された位相のずれ δ_l の意味も変ってくる．そこで，この節では解析的な手続きの大要を示し，もっと進んだ取り扱い[1)]によって得られる主要な結果を引用しておくに止める．

21-1 放物線座標

純粋のクーロン場に対する $\sigma(\theta)$ だけを求めようとするかぎりでは，波動方程式を放物線座標（§16をみよ）によって分離する方が，球面座標を使うより取り扱いが簡単である．その理由は，求められている解が方程式（16.25）で定義されている変数 ξ だけによってほとんど完全にきまり，他の二つの変数 η および ϕ にはよらないからである．解が ϕ を含まないはずだということは，問題の軸対称性から明らかである；そこで，入射波を表わす項 e^{ikz} が全体の解の一つの因子として取り出されるものとすると，解の残りの部分は η を含まないとは当然考えられることである．そこで次のようにおく．

$$u_c=e^{ikz}f \tag{21.2}$$

ただし，u_c は完全なクーロン波動関数（入射波＋散乱波）を表わしている．ところで，u_c にはその漸近的な振舞いが主として $r^{-1}e^{ikr}$ の形できまる部分が含まれているはずであるが，$r^{-1}e^{-ikr}$ となるような部分を含んではならない（方程式（18.10）を見よ）．$e^{ikz}f(r+z)$ という形では今のべた形式にはできないが，$e^{ikz}f(r-z)$ という形であれば可能である．したがって，(21.2) の関数 f は $\xi=r-z$ にだけ関係しているだろうという予想がたつわけである．

方程式（16.26）で Z を $-ZZ'$ で置き換えてから，それに（21.2）を代入し，$E>0$ であることに注意すれば，f に対する微分方程式は

$$\xi\frac{d^2f}{d\xi^2}+(1-ik\xi)\frac{df}{d\xi}-nkf=0 \tag{21.3}$$

1) W. Gordon, *Zeits. f. Phys.* **48**, 180, (1928)；N. F. Mott-H. S. W. Massay, 第二版 "The Theory of Atomic Collision" (Oxford, New York, 1949) 第III章．数学的な予備知識については E. T. Whittaker and G. N. Watson, "A Course of Modern Analysis" (Cambridge, London, 1935) の4版．16章を見よ．

となる．合流型の超幾何関数 $F(a,b,z)$ を解にもつ微分方程式

$$z\frac{d^2F}{dz^2}+(b-z)\frac{dF}{dz}-aF=0 \tag{21.4}$$

は，Cを常数として

$$f(\xi)=CF(-in,1,ik\xi) \tag{21.5}$$

とおけば，方程式 (21.3) と同じになる．

21-2 合流型超幾何関数

方程式 (21.4) の $z=0$ で正則な解は，冪級数の形で次のように書くことができる．

$$F(a,b,z)=\sum_{s=0}^{\infty}\frac{\Gamma(a+s)\Gamma(b)z^s}{\Gamma(a)\Gamma(b+s)\Gamma(1+s)}$$

$$=1+\frac{az}{b1!}+\frac{a(a+1)z^2}{b(b+1)2!}+\cdots \tag{21.6}$$

W_1 および W_2がそれぞれ別々に方程式 (21.4) の解であるとして，$F(a,b,z)=W_1(a,b,z)+W_2(a,b,z)$ とおくと便利である．そうすると，F に対する漸近展開式は次の諸関係から求めることができる．

$$W_1(a,b,z)=\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)}(-z)^{-a}g(a,a-b+1,-z)$$

$$W_2(a,b,z)=\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)}e^z z^{a-b}g(1-a,b-a,z) \tag{21.7}$$

$$g(\alpha,\beta,z)\underset{z\to\infty}{\longrightarrow}1+\frac{\alpha\beta}{z1!}+\frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{z^2 2!}+\cdots$$

原点で正則でない方の解としては，次のようにとることができる．

$$G(a,b,z)=iW_1(a,b,z)-iW_2(a,b,z) \tag{21.8}$$

後でわかるように，クーロン場を $r=0$ にまで延長して考える必要のない問題では，この正則でない解が必要になってくる．

クーロン波動関数の漸近形は，(21.2)，(21.5)，(21.7) の方程式から求められる．結果は，r^{-1} のオーダーの項をまとめて次のようになる．

$$u_c\underset{r\to\infty}{\longrightarrow}\frac{Ce^{\frac{1}{2}n\pi}}{\Gamma(1+in)}\left\{e^{i[kz+n\ln k(r-z)]}\left[1+\frac{n^2}{ik(r-z)}\right]\right.$$

$$\left.+r^{-1}f_c(\theta)e^{i(kr-n\ln 2kr)}\right\} \tag{21.9}$$

$$f_c(\theta)=\frac{\Gamma(1+in)}{i\Gamma(-in)}\frac{e^{-in\ln(\sin^2\frac{1}{2}\theta)}}{2k\sin^2\frac{1}{2}\theta}$$

$$=\frac{n}{2k\sin^2\frac{1}{2}\theta}e^{-in\ln(\sin^2\frac{1}{2}\theta)+i\pi+2i\eta_0} \qquad (21.10)$$

$$\eta_0=\arg\Gamma(1+in)$$

である．[1)]

21-3 散乱面積と規格化

方程式 (21.9) の右辺の f_c の項は $r^{-1}e^{ikr}$ の因子が現われている唯一の項であるから，散乱されて出てゆく波を表わしているわけである．同様に，方程式 (21.9) の第一項は入射"平面"波を表わしている；$+n^2/ik(r-z)$ という乗数因子は，漸近形をとる領域では無視することができる．入射波も散乱波も，無限の遠方では対数的な位相因子によって歪んでいる．散乱の微分断面積は，方程式 (18.11) にしたがえば，次式であたえられる．

$$\sigma_c(\theta)=|f_c(\theta)|^2=\left(\frac{n}{2k\sin^2\frac{1}{2}\theta}\right)^2=\left(\frac{ZZ'e^2}{2\mu v^2}\right)^2\operatorname{cosec}^4\tfrac{1}{2}\theta \qquad (21.11)$$

これは Rutherford が古典力学を使って求め，アルファー粒子（ヘリウム原子核）と重い原子核との衝突に対して実験的に検証した公式と丁度一致している．しかしながら，注意すべきことは，(21.10) で与えられている散乱振幅 $f_c(\theta)$ 中の角を含んだ位相因子の部分は，同種粒子の衝突の場合には非古典論的な仕方で，結果に利いてくる可能性があるということである（§40をみよ）．

もし入射粒子束が単位流束に規格化されているとすれば，定数Cを次のように選んでおかねばならない．

$$C=v^{-\frac{1}{2}}\Gamma(1+in)e^{-\frac{1}{2}n\pi}$$

したがって，クーロン波動関数は次のようになる．

$$u_c=v^{-\frac{1}{2}}\Gamma(1+in)e^{-\frac{1}{2}n\pi}e^{ikr}F(-in,1,ik\xi)$$

$$=v^{-\frac{1}{2}}\Gamma(1+in)e^{-\frac{1}{2}n\pi}e^{ikr\cos\theta}F(-in,1,2ikr\sin^2\tfrac{1}{2}\theta) \qquad (21.12)$$

すると，$r=0$ での粒子密度は (21.6) の冪級数展開の式を使って次のようになる．

$$|u_c(0)|^2=|C|^2=v^{-1}|\Gamma(1+in)|^2e^{-n\pi}$$

---

1) 実の量 $\phi=\arg z$ は $z=|z|e^{i\phi}$ という関係で定義されている．

$$=\frac{2n\pi}{v(e^{2n\pi}-1)} \tag{21.13}$$

衝突粒子の速度が小さい場合（$|n|\gg 1$）には，方程式（21.13）からわかるように

$$\begin{aligned} |u_c(0)|^2 &\approx \frac{2\pi|n|}{v} && \text{引力の場合，} n<0 \\ |u_c(0)|^2 &\approx \frac{2\pi n}{v}e^{-2n\pi} && \text{斥力の場合，} n>0 \end{aligned} \tag{21.14}$$

方程式（21.14）の第二のものは，実用上多少興味のある結果を示している．というのは，低い衝突エネルギーで正の荷電の原子核同志がぶつかり合う反応を考え，かつそのとき，核の半径は十分小さく，反応が始まるために衝突し合う原子核が互いの距離が零になるまでクーロンポテンシャルの障壁を貫通して接近しなければならないという仮定が許されるものとすれば，この反応速度を支配する因子は（21.14）の指数因子になる．この場合 $\exp(-2\pi ZZ'e^2/\hbar v)$ という因子は**ガモフの因子** *Gamow factor*[1)] とよばれるが，それは低エネルギーでの多くの原子核反応の生起率についての支配的な項になっている．

21-4　球座標での解

数百万電子ボルトのエネルギーの陽子の水素中での散乱というような，原子核の衝突問題では，衝突しあう粒子の距離が，非常に小さくなったところでの相互作用のクーロン法則からのずれが散乱の断面積に影響をおよぼすことがありうる．このような問題は，§19で説明した部分波の方法に少し変更を加えて取り扱うことができる．つまり，純粋のクーロン場に対して調和球面関数による展開をしておいて，その最初の二，三の l の値の対する部分に変形を修正してゆくわけである．そのようなやり方を適用するためには，まず純粋のクーロン散乱に対する球面部分波による解が必要になる．

そのために，次のようにおく．

$$u_c=\sum_{l=0}^{\infty}R_l(r)P_l(\cos\theta) \tag{21.15}$$

ただし，$R_l(r)$ の満たす動径方向の波動方程式は次式で与えられる．

---

1) G. Gamow, *Zeits. f. Phys.*, **51**, 204 (1928)；R. W. Gurney and E. V. Condon, *Phys. Rev.*, **33**, 127 (1929).

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_l}{dr}\right)+\left[k^2-\frac{2nk}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l=0 \tag{21.16}$$

ここで，$R_l(r)=r^le^{ikr}f_l(r)$ と置き換えると，f_l に対する方程式は次のようになる．

$$r\frac{d^2f_l}{dr^2}+[2ikr+2(l+1)]\frac{df_l}{dr}+[2ik(l+1)-2nk]f_l=0 \tag{21.17}$$

これは（21.4）の合流型の超幾何関数の方程式と同型で，したがって $r=0$ での正則な解として次のものがある．

$$f_l(r)=C_lF(l+1+in, 2l+2, -2ikr) \tag{21.18}$$

（21.18）の漸近形は，（21.7）から求められ，結局極く遠方での動径方向の波動函数として次のものが得られる．

$$R_l(r)\underset{r\to\infty}{\longrightarrow}\frac{C_le^{\frac{1}{2}n\pi+i\eta_l}\Gamma(2l+2)}{(2k)^l\Gamma(l+1+in)kr}\sin\left(kr-\tfrac{1}{2}l\pi-n\ln 2kr+\eta_l\right), \tag{21.19}$$

ただし，

$$\eta_l=\arg\Gamma(l+1+in)$$

である．

係数 C_l は，部分波による展開（21.15）が放物線座標での解（21.12）と一致するようにきめられねばならない．Legendre 多項式の直交性によって，次の関係式が得られる．

$$R_l(r)=\frac{2l+1}{2}\int_0^\pi P_l(\cos\theta)u_c(r,\theta)\sin\theta d\theta \tag{21.20}$$

ただし，$u_c(r,\theta)$ は方程式（21.12）の第二の式で与えられているものである．これまでに $R_l(r)$ については，乗数因子 C_l という定数を除けばすべてわかっているという事実を利用すれば，（21.20）の積分を実際終りまで遂行しなくてもすませることができる．つまり，$R_l(r)$ の既知の形を $r=0$ の近傍での方程式（21.20）と合うように調整すれば，C_l が求められる．その結果は次のようになる．

$$C_l=\frac{(2ik)^le^{-\frac{1}{2}n\pi}\Gamma(l+1+in)}{v^{\frac{1}{2}}(2l)!}$$

結局，（21.12）の今一つの表わし方として次式が得られる．

$$u_c=v^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}n\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\Gamma(l+1+in)}{(2l)!}(2ikr)^le^{ikr}$$
$$F(l+1+in, 2l+2, -2ikr)P_l(\cos\theta) \tag{21.21}$$

方程式 (21.10) であたえられている $f_c(\theta)$ を Legendre 多項式の級数に直接展開することも可能である；その結果は

$$f_c(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{2i\eta_l}P_l(\cos\theta) \tag{21.22}$$

となる．この結果は一見驚くべきことのように思われる．というのは，相互作用のない状態に対応する $n\to 0$ の極限において，$f_c(\theta)$ は零になりそうにもないように見えるからである．ところが実際この極限をとってみると，

$$\lim_{n\to 0} f_c(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)$$

の右辺の級数の和は求めることができて，

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)=4\delta(1-\cos\theta) \tag{21.23}$$

となる．(21.23) の方程式の証明は，両辺に $P_{l'}(\cos\theta)$ をかけて，$\sin\theta d\theta$ について 0 から π まで積分してやればよい．ただし，その際右辺の積分は $\theta=0$ まで行なうが，点 $\theta=0$ を通らないように注意すること．要するに $f_c(\theta)$ は $\theta\neq 0$ の場合は $n\to 0$ の極限で実際零になるが，$\theta=0$ では δ 関数的な特異性をもっているのである．つまり，任意の有限の θ_0 に対して，

$$\lim_{n\to 0}\int_0^{\theta_0} f_c(\theta)\sin\theta d\theta=-\frac{i}{k} \tag{21.24}$$

となる．(21.24) の方程式は (21.10) を直接に積分しても容易に証明される．ただしその際，下限における積分値を ϵ での積分値の $\epsilon\to 0$ での平均と解釈するものとする．このような特異な振舞いは作用距離が長いというクーロン場の特性に起因するものである．つまり相互作用としてはどんなに弱くなっていても，極めて遠距離を通過する粒子はクーロン場によって極めて小さな角度での偏向をうけることになるというわけである．

21-5 修正クーロン場

実際のポテンシャルが，r の小さい値のところでだけクーロン型からずれているという場合には，§19 の部分波による取り扱いの類推から，(21.21) の和の中で最初の二，三の項にのみ変更を加えればよいだろうと予想される．動径方向の部分波の波動関数は，それぞれポテンシャルが異常性を示している領域の外側では (21.16) の一つの解

になっていなければならないのだから，f_l にもち込むことができ，しかもなお f_l を（21.17）の一つの解にしておくことができる変更としては，（21.8）で定義された正則でない解 $G(l+1+in, 2l+2, -2ikr)$ を付け加えるのが唯一のやり方である．そして，完全な波動関数が漸近的にクーロン場での入射プラス散乱波の他に余分の**外向きの** *out-going* 散乱波を表わすはずだという要求によって，G を付け加えるやり方がきまることになる．

したがって，（21.21）のそれぞれの F の項を F と G の一次結合で置き換え，かつその一次結合で内向きの項 W_2 の量が変わらないようにしておかなければならない．そのような一次結合は次のようになる．

$$e^{i\delta_l}(F\cos\delta_l+G\sin\delta_l)=W_1e^{2i\delta_l}+W_2$$

結局，ポテンシャルが異常性を示す領域の外側で，波動方程式の一つの解になるように修正されたクーロン波動関数は，次のように書くことができることになる．

$$u_m=u_c+v^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}n\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\Gamma(l+1+in)}{(2l)!}(2ikr)^l e^{ikr}$$
$$(e^{2i\delta_l}-1)W_1(l+1+in, 2l+2, -2ikr)P_l(\cos\theta) \qquad (21.25)$$

u_m の漸近形は

$$u_m \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} v^{-\frac{1}{2}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l e^{i(\eta_l+\delta_l)}(kr)^{-1}$$
$$\sin\left(kr-\tfrac{1}{2}l\pi-n\ln 2kr+\eta_l+\delta_l\right)P_l(\cos\theta) \qquad (21.26)$$

となる．方程式（19.5）に関連して示したように，V が実の量であるとすれば（21.26）の右辺の各項は複素数の乗数因子を除けば，r の実関数でなければならない．したがって δ_l もまた実数でなければならない．

付け加わわった位相のずれ δ_l を求めるには，§19で位相のずれを求めたのと全く同様に，方程式（21.25）でのそれぞれの動径方向の部分波の波動関数をポテンシャルが異常になる領域の端で内部の解と一致させればよい．ただし，§19では，位相のずれ δ_l は自由粒子の波動関数からの実際の波動関数のずれを表わすものであったが，ここでの δ_l は純粋のクーロン場によった散乱された粒子の波動関数からのずれを表わしているわけである[1]．方程式（21.25）から，u_m の漸近形も（21.9）の形に書くことができることがわかる．ただし，その場合 $f_c(\theta)$ を次のもので置き換えておかねばなら

ない．

$$f_m(\theta)=f_c(\theta)+\sum_{l=0}^{\infty} k^{-1}(2l+1)e^{i(2\eta_l+\delta_l)}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \qquad (21.27)$$

$|f_m(\theta)|^2$ は散乱の微分断面積に他ならないが，これは一般には，クーロンの散乱振幅 $f_c(\theta)$ と δ_l できまる余分の項との間の干渉項を含んでいる．

21-6 純粋のクーロン場に対する古典論的な極限

§12で論じたように，ひどく早く拡がってしまうことなく古典的な軌道に従って運動する波束で，その大きさがその内部での作用力が大体一定と考えられる程度に十分小さいものをつくることができる場合には常に，量子論と古典論との結果は一致するものと予想しておいてよい．ところで，その際わかったように，時間間隔 t の間の波束の最小の拡がりは $(\hbar t/\mu)^{1/2}$ のオーダーである．これは，時間 t 中に波束が走る距離 $d=vt$，および相対運動に対する換算波長 $\lambdabar\equiv\lambda/2\pi=\hbar/\mu v$ を使えば，$(\hbar d/\mu v)^{1/2}=(\lambdabar d)^{1/2}$ ともかける．結局，古典論は $(\lambdabar d)^{1/2}\ll d$ または $(d/\lambdabar)^{1/2}\gg 1$ の場合に使いうる．この d はまた，力がそれ自身の大きさに対してかなりの割合の変化を示す領域の大きさでもある．クーロンの斥力場に対しては，d は古典論の最近接距離 $|ZZ'e^2/\frac{1}{2}\mu v^2|$ のオーダーである．この大きさはクーロンの引力場に対してもまた有用な目安をあたえるものである．というのは，粒子が大きな角度で散乱される比較的小数の例を除けば，すべての衝突において，粒子は互いにこの距離以上に接近することはないからである．

結局，古典論の成立するための条件は次のようになる．

$$|n|^{\frac{1}{2}}=\left|\frac{ZZ'e^2}{\hbar v}\right|\gg 1$$

n が大きいということは，(21.10) であたえられる $f_c(\theta)$ の位相の，角度を含む部分が θ とともに非常に早く変化することを意味している．この散乱振幅中の早い振動の部分は，衝突粒子が同一粒子である散乱の結果にはほとんど影響をあたえないはずである（第XI章の問題6を見よ）．

クーロン場に対しては，古典論的な極限が小さな v によって達せられるのに対し

---

1) （前頁）方程式 (20.22) の δ_l を計算するには，r の小さいところでの G についての知識を必要とするが，その際に便利な諸公式は次の文献にあたえられている．F. I. Yost, J. A. Wheeler, G. Breit, *Phys. Rev.* **49**, 174 (1936).

て，有限の作用半径 a をもつポテンシャルでは§19で調べたように，古典論の極限は $(a/\lambda\!\!\!^{-})^{1/2}\gg 1$ すなわち大きな v によって達せられるということは注目に値することである．このことの理由は，クーロン場の“大きさ” $|ZZ'e^2/\mu v^2|$ が v が小さくなるにつれて $\lambda\!\!\!^{-}=\hbar/\mu v$ よりも早くふえるためなのである．

問　　題

1．一次元の角井戸型ポテンシャル（$V_0<0$ ということを除けば第14図に同じ）による散乱係数は，方程式（17.5）で，そこの V_0 自身および α の表式中の V_0 の符号を変えたものによって与えられることを示せ．また同じ場合について，透過係数の E による変化をしらべよ．

2．もし γ が（18.5）で与えられるならば，一般の二体の衝突に対して方程式（18.4）と（18.7）が成り立つことを示せ．ただしエネルギーと質量の保存則を利用すること．

3．質量 m_1 の粒子が最初静止している質量 m_2 の粒子と弾性的に衝突した場合，すべての反跳粒子（質量 m_2）は実験室系では前方の半球内に散乱されることを示せ．また，もし，角分布が重心系で球対称であるならば，実験室系での粒子 m_2 に対する角分布はどうなるか？

4．散乱ポテンシャルの外部（必ずしも漸近領域とは限らぬ）での，散乱波動関数（19.1）を平面波と第一種の球面 Hankel 関数（方程式（15.12）を見よ）の和として表わせ．この表式と方程式（15.13）についての議論を使って，漸近領域の内側においても，散乱波は純粋に外向きの波であることを示せ．

5．2個の物体 A, B は，不規則な形をしているが，その大きさおよび形とも同一であるとする．物体 A はプラス無限大（すなわち非透過性）のポテンシャルで満たされており，質量 m の粒子が A によって散乱される．物体 B は金属でつくられており，他の物体から絶縁されたときの静電気容量 C をもつ．物体 A による質量 m の粒子の弾性散乱に対する微分および全断面積の表式を，物体 B の容量 C を使って $k\to 0$ の極限で導け．

6．$A>0$ として，散乱ポテンシャル $V(r)=A/r^2$ によって生じる位相のずれの一般公式をつくれ．全断面積は有限になるか？　もし有限にならないとすれば，その発散は小さい角の散乱に起因するか，大きな角の散乱に起因するか，またその理由は？　もし $A<0$ とすれば，この場合の計算にはどのような変更が必要になるか？　$A<0$ の場合の計算には何らかの困難な事情が起こってくるであろうか？

7．散乱断面積が零エネルギーで零であるためには（Ramsauer-Townsend 効果），三次元の井戸型ポテンシャルに対する V_0a^2 はいかなる値でなければならないか？　小さな衝突エネルギーでの微分断面積および全断面積に対する表式中の主要項を求め，$l>2$ をもつ部分波は無視しうることに注意せよ．

8．方程式（19.31）を導き出すにあたっての仮定を明確に述べよ．そして，それが $l=0$ の波が共鳴している場合，低い衝突エネルギーでの全断面積に対するよい近似につながっていることを証明せよ．

9. 方程式（19.31）と第Ⅳ章の問題5の結果を利用して，ある特定のポテンシャルによる全断面積の衝突エネルギーEおよびそのポテンシャル内での粒子の結合エネルギーϵによる近似式をつくれ．ただしEおよびϵはいずれもV_0に比べて小さいものとする．

10. 完全剛体球による散乱で$ka=1/2$として，最初の三つの部分波（$l=0,1,2$）を用いてその散乱の微分断面積を計算し，角度を横軸にとりグラフをつくれ．また，この場合の全断面積はどうなるか．三つの項のみを使った結果の大体の正確度はどの程度か？

11. ポテンシャル$V(r)=-V_0(1+i\xi)$，$r<a$；$V(r)=0$，$r>a$による弾性散乱および吸収断面積を計算せよ．ただし，V_0およびξは正とする．なお，kおよびξは極めて小さく，かつ共鳴および Ramsauer-Townsend 効果はいずれも存在しないと仮定せよ．各断面積において，kおよびξについての主要項のみをとり出せ．

12. 任意のポテンシャルに対して次の不等式が成立することを証明せよ．

$$\sigma_{\mathrm{el}}(0)\geq\left(\frac{k\sigma_{\mathrm{tot}}}{4\pi}\right)^2$$

ただし，左辺の量は前方における弾性散乱の微分断面積である．

13. 200,000電子ボルトのエネルギーの陽子がアルミニウムによって散乱される場合，まっすぐ後方に跳ね返えされてくる強度（$\theta=180°$）は Rutherford の公式を用いて計算したものの96%であることが知られている．この結果が，$l=0$の波に対する位相のずれへの影響だけを考えればよい程度に十分短距離でのクーロン・ポテンシャルからのずれによるものと仮定した場合，このポテンシャルの変形された部分は引力か，斥力か？ この変形ポテンシャルによって生じた$l=0$の波の位相のずれにおける変化の符号と大きさを求めよ．

第VI章　量子力学の行列形式

これまでの4つの章で，Schrödinger の波動方程式を調べ，幾つかの物理的に興味のある場合について，その解を求めてきた．この章では，量子力学をもう一つの形式によって定式化することに話を転じよう．この形式では，ある粒子の座標，運動量の成分，エネルギー等のような力学変数は，波動関数にかけられたり，波動関数を微分したりする必要がなく系の運動方程式の中にそのまま現われてくることになる．古典論の方程式は正にこのような構造のものであるから，このような形式では Schrödinger の理論の場合に比べて，古典論と量子論との定式化の一層密接な類似がみられるだろうということは十分予想されることである．

実際この予想は実現される．ただし，形式上のちがいとして基本的なのは，量子論の力学変数は乗法の交換法則にしたがわないということである．このような非可換的な力学変数は，しばしば簡単に**演算子** *operator* とよばれているが，行列として表現するのが便利である．行列の理論というものは，非常に幅の広い表現方法になっている．というのは行列の行と列の選び方には，そのすべてが同格な，いくらでも多くの仕方があるからである．量子行列力学が，1925年 Heisenberg によって発見された量子論の最初の定式化だったということは，量子行列力学と古典力学との密接な形式の類似によるのである[1)]．

この章では，まず簡単に，行列の比較的重要な性質をまとめて列挙して，次に行列と量子力学との関係を示し，特殊な問題についてその有効なことを示すことにする。

---

1) W. Heisenberg, *Zeits. f. Physik*, **33**, 879 (1925)；M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, *Zeits. f. Phys.*, **35**, 557 (1925). 量子行列力学と波動方程式との関連は，E. Schrödinger, *Ann. d. Physik.*, **79**, 734 (1926), および C. Eckart, *Phys. Rev.*, **28**, 711 (1926) によって確立された．この歴史的展開は，S.-I. Tomonaga, "Quantum Mechanics (Interscience, New York, 1962) (朝永振一郎「量子力学」〔みすず書房〕) 第5章で総合的に取り扱われている．

22□行 列 代 数

まず最初は，議論を有限個の行と列をもつ行列に限り，次にそうして得られた結果が，無限に多くの行と列を持つ行列にも移せることを示すことにする.[1]

22-1 行列の加法と乗法

行列 *matrix* とは，数を正方形または矩形状に配置したもので，ある規則にしたがって他の行列と加え合わせたり，掛け合わせたりすることができるものである．一つの行列を A のような大文字で，それを作り上げている数，すなわち**要素** *element* を A_{kl} のような添字つきの同じ文字で表わすことにする．ここで k, l はそれぞれ行列要素 A_{kl} が現われる行と列とを示している．二つの行列は同じ**次数** *rank**[*]，すなわち同じ数の行と同じ数の列を持つときに加え合わすことができる．この加法は可換である：

$$A+B=B+A \tag{22.1}$$

もし和の行列を C とよぶことにすると，C の行列要素は次式で与えられる.

$$C_{kl}=A_{kl}+B_{kl} \tag{22.2}$$

もし，一つの行列 A の列の数が，他の行列 B の行の数に等しいならば A を B に左から掛け合わせることができ，そのときの積の行列 C の行と列の数はそれぞれ A の行の数および B の列の数になる.

$$C=AB, \quad C_{kl}=\sum_m A_{km}B_{ml} \tag{22.3}$$

ここで和は添字 m についてとられるが，この m は A の列と B の行を表わしている．方程式 (22.2) と (22.3) から直ちに，乗法の分配則が成立することが分かる．すなわち

$$A(B+C)=AB+AC \tag{22.4}$$

また，乗法の結合則も成立つこともわかる.

$$A(BC)=(AB)C \tag{22.5}$$

---

1) 完全な議論については，J. von Neumann, "Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik," (Springer, Berlin, 1932, または Dover, New York の複刻版) 〔邦訳：井上・広重・恒藤訳「量子力学の数学的基礎」(みすゞ書房)〕第II章を見よ.

*) 普通 rank の訳語として用いられる階数というのとはこの場合元の定義が異なっているので一応次数という言葉をあてることにする.

ただし，左辺では A が左側から B と C の積に掛けられることを意味し，右辺では A と B の積が左側から C にかけられることを意味している．積（22.5）は単に ABC と書かれ，その行列要素の具体的な表式は（22.3）によって次のようになる．

$$D=ABC,\quad D_{kl}=\sum_{m,n}A_{km}B_{mn}C_{nl} \tag{22.6}$$

方程式（22.3）から AB は一般には BA に等しくないことが明らかである：つまり，乗法の交換則は一般には成立しないのである．

22-2 零行列，単位行列，および定数行列

任意の正方行列 A に対し，**零行列** *null matrix* $\bigcirc$ を次の方程式によって定義する．

$$\bigcirc A=\bigcirc \qquad A\bigcirc=\bigcirc \tag{22.7}$$

これから，$\bigcirc$ のすべての要素は零であることがわかる．もし，A が正方行列でなくっても，やはり〔(22.7) を満たす〕$\bigcirc$ の要素はすべて零ではあるが，ただし（22.7）のちがった場所に現われる $\bigcirc$ はすべて同じ数の行と列をもたないことになる．

単位行列 *unit matrix* $\mathbf{1}$ は，任意の行列 A および B に対して

$$\mathbf{1}A=A \qquad B\mathbf{1}=B \tag{22.8}$$

で定義される．（22.8）の方程式から，$\mathbf{1}$ はその次数（行と列の数）が A の行の数または B の列の数に等しい正方行列であることが結論される．さらに，$\mathbf{1}$ はその対角線 ($k=l$) にそって単位元素をもたなければならず，また他は零でなければならない．つまり $\mathbf{1}$ の行列要素は，§10 で導入した Kronecker の記号 δ_{kl} に他ならない．

ある数 c と行列 A との積は，A のおのおのの要素に c を掛けてつくられる行列 cA である．そこで，もし**定数行列** *constant matrix* C を，単位行列の倍数，すなわち，その零でない各要素が $\mathbf{1}$ でなく c であるようなものと定義すると

$$cA=CA,\qquad C_{kl}=c\delta_{kl} \tag{22.9}$$

ただし，C_{kl} は定数行列 C の行列要素である．

22-3 行列の跡，行列式，および逆行列

正方行列の**跡** *trace*〔以下では tr とかく〕は，**シュプール** *spur* または**対角和** *diagonal sum* とよばれることもあるが，行列の対角線要素の和である．

$$\mathrm{tr}(A)=\sum_k A_{kk} \tag{22.10}$$

(22.3) を利用すれば，トレースは次の循環性をもつことが容易に証明される．

$$\mathrm{tr}(ABC\cdots EF)=\mathrm{tr}(BC\cdots EFA) \tag{22.11}$$

正方行列の**行列式** *determinant* は $\det(A)$ と書かれるが，これを求めるには，正方形の数の配置としての行列式の計算に対する一般の規則によればよい．A および B を同じ次数の正方行列とすれば，

$$\det(AB)=\det(A)\cdot\det(B) \tag{22·12}$$

行列 A は，次の関係で定義される**逆** *inverse* をもつこともあるが，もたないこともある．

$$AA^{-1}=\mathbf{1} \qquad A^{-1}A=\mathbf{1} \tag{22.13}$$

もし，A が逆をもつならば，それは**正常または正則** *nonsingular* であるといわれ，そうでないときは**異常** *singular* であるといわれる．もし A が正常でかつ有限の次数の行列であれば，A は正方行列であることが証明される．また，(22.13) のどちらか一方から他方が導かれる (問題 2 を見よ)．逆行列 A^{-1} の kl 要素は，ちょうど A_{kl} の**余因子** *cofactor* を $\det(A)$ で割ったものになる；したがって A はその行列式が零になる場合に異常であることになる．正常な行列について，次の式はすぐに証明される．

$$(ABC)^{-1}=C^{-1}B^{-1}A^{-1} \tag{22.14}$$

22-4 エルミット行列とユニタリー行列

行列 A の**エルミット共役な** *Hermitian adjoint* 行列 $A^\dagger$ とは，A の行と列を入れかえて，そのおのおのの要素の複素共役数をとってつくられる行列である；したがって

$$B=A^\dagger \quad \text{ならば} \quad B_{kl}=A_{lk}^* \tag{22.15}$$

幾つかの行列の積のエルミット共役は，それぞれの行列のエルミット共役行列の逆の順番での積になることは容易に証明される．

$$(ABC)^\dagger=C^\dagger B^\dagger A^\dagger \tag{22.16}$$

もし，ある行列がそのエルミット共役に等しいならば，それは**エルミチアン** *Hermitian* または**自己共役** *self-adjoint* であるという．すなわち，もし

$$H=H^\dagger \tag{22.17}$$

ならば H はエルミット行列である．明らかに正方行列に限りエルミチアンでありうる．

もし，ある行列のエルミット共役がその逆に等しいときは，その行列は**ユニタリー** *unitary* であるという．すなわち，もし

$$U^{\dagger}=U^{-1} \quad \text{または} \quad UU^{\dagger}=\mathbf{1} \quad \text{かつ} \quad U^{\dagger}U=\mathbf{1} \tag{22.18}$$

であるならば，Uはユニタリー行列である．次数の有限なユニタリー行列は必ず正方行列でなければならない．その場合（22.18）の後の二つの方程式の一方は他方を含んでいる．

22-5　行列の変換と対角化

正常な行列Sによる，正方行列Aの他の正方行列A'への**変換** *transformation* を，次の方程式にしたがって定義する．

$$SAS^{-1}=A' \tag{22.19}$$

この場合，S^{-1}がA'を変換してもとのAにもどすことは明らかである．

この変換によって，行列方程式の形は影響をうけない．つまり，たとえば，方程式

$$AB+CDE=F$$

は

$$SABS^{-1}+SCDES^{-1}=SFS^{-1}$$

に変換されるわけであるが，それはかきかえれば

$$SAS^{-1}\cdot SBS^{-1}+SCS^{-1}\cdot SDS^{-1}\cdot SES^{-1}=SFS^{-1}$$

または

$$A'B'+C'D'E'=F'$$

に等しい．ここで肩のダッシュは変換された行列を示している．この行列方程式の変換に対する不変性ということは，一連の行列として得られた結果の正しさをそこなうことなく，それに任意の便利な変換を施して取り扱うことを可能にするのである．また注意すべきことは，$\mathrm{tr}(A)$ および $\det(A)$ は変換によってその値が変らないということである．

正方行列が，対角線（$k=l$）にそってだけ零でない要素をもつならば，それは**対角型** *diagonal* であるという．そのときの対角要素は，その行列の**固有値** *eigenvalue* とよばれる．対角行列のn次の冪はやはり対角型であって，その固有値として元の行列の固有値のn次の冪を持つことはすぐにわかる．方程式（22.19）で，もし変換によっ

て生じた行列 A' が対角型，つまり $A'_{kl}=A'_k\delta_{kl}$ となるならば，行列A は行列S によって**対角化された** *diagonalized* といわれる．A' の形を具体的に求めるために，(22.19) を満たすようなSが存在するものと仮定して，(22.19) に右側からSを掛けると，

$$SA=A'S \tag{22.20}$$

となる．特定の行kとすべての列lに対して，行列方程式 (22.20) の要素を書き出すと次のような一次の代数方程式の組が得られる．

$$\sum_m S_{km}A_{ml}=A'_kS_{kl} \quad \text{または} \quad \sum_m S_{km}(A_{ml}-A'_k\delta_{ml})=0 \tag{22.21}$$

ここで，A'_k は A' の特定の固有値であり，添字mに対する和は1から行列Aの次数Nまでの和である．

今 (22.21) を，kを固定したときの変換の行列要素 S_{km} に対するN個の斉次の代数方程式の組とみなすことができる．これらの方程式が解を持つ必要かつ十分な条件は，それ等の係数の行列式が零となること，いいかえると，正方行列 $(A_{ml}-A'_k\delta_{ml})$ の行列式が零となることである．これは，**永年方程式** *secular equation* とよばれる単一の代数方程式を与え，それはN次でN個の根 A'_k を持っている．このように，Aから変換によって得られる対角行列 A' の固有値は，それらが配列されている順番を除けば，Aがどんなふうに対角化されるかにかかわらず同一である．この理由のために，これらもまた対角型でないもとの行列Aの固有値とよばれるのである．二つまたはそれ以上の固有値が相等しい場合，A' およびAは**縮退している** *degenerate* とよばれる．

一般にAと$A^\dagger$の両方を含む方程式は，変換行列Sがユニタリーでないならば，変換に関して不変にはならないということを示すことは困難でない．

22-6 行 列 の 関 数

ある行列の関数というものを，冪級数を使って定義できる場合が少なくない．たとえば，$f(z)$ を数zについての多項式とすれば，$f(A)$ は行列Aについての同じ多項式である．無限級数に関しては，収斂という点に対して若干注意しておかなければならない．もしもAが対角化可能であって，$A'=SAS^{-1}$ で対角型にされるものとすれば，この同じ変換Sが同時に $f(A)$ を対角型の $f(A')$ に変換することになり，$f(A')$ のk番目の固有値は $f(A_k')$ に他ならないということは明らかである．したがって，も

しも冪級数 $f(z)$ が A のそれぞれの固有値に z が等しいときに収斂するならば，冪級数 $S^{-1}f(A')S=f(A)$ ははっきり定義されている．この最後の定義は $f(z)$ が冪級数で表わされえない場合にも $f(A)$ の定義を与えるものとして利用することができる．

行列の指数関数および三角関数は，それらの変数のすべての有限値に対して収斂する冪級数として表現することが可能であり，その意味ではっきり定義される．たとえば，$(e^A)^\dagger=e^{A\dagger}$ で，したがってHがエルミチアンであれば e^{iH} はユニタリーであることは容易に証明される．

もう一つのよく利用される結果として次の関係がある（問題3を見よ）

$$\det(e^A)=e^{\mathrm{tr}(A)} \tag{22.22}$$

22-7 無限次数の行列

行列の加法，乗法に対する規則（22.2）（22.3）は，（22.3）に現われる無限和が収斂するかぎり，明らかに無限に多くの行と列をもった行列に対しても，そのまま採用しておいてよい．無限といっても番号をつけられない無限に多くの行または列，もしくはその両方をもつ行列を取り扱うことがよくある；このときには，添字の一方または両方が連続な変数となり，添字に対する普通の和がその変数に対する積分に置き換えられることになる．ここでは，そのことが果して可能かどうかについては立ち入って考えないことにして，ただ単に，一応無理のない結果は，すべて困難なしに次数有限の行列の場合から次数無限の行列の場合に，そのまま採用できるものと仮定する[1]．次数が無限大のエルミット行列は正方行列であるということは，その行と列とが同じ方法で順序づけられるということを意味している．ユニタリー行列の場合は，無限大の次数でも正方型であることを要しない．ということは，その行と列とは別な方法で順序づけられてよい；たとえば，行の数は番号のつけられる無限大であり，列の数は番号のつけられない無限大であってもよい．

量子力学では，基本的には，無限大の次数の，エルミット行列およびユニタリー行列を取り扱うことになる．その場合次の基本定理を証明なしに仮定することにする．それはどんなエルミット行列も一つのユニタリー変換によって対角化されるという定理

1) この点に対するもっと完全な議論と，次にでてくる定理の証明は，J. von Neumann（前掲書）に与えられている．

である；この定理の系として，エルミット行列から求められる固有値は，それがならべられる順序を除いて一意的であるということになる．この定理から出発して，容易に証明されることは，二つのエルミット行列が同一のユニタリー変換によって対角化されることの必要十分な条件は，それらが**可換である** ***commute*** こと（行列 A と B は，$AB=BA$ のとき可換であるという）である（問題1を見よ）．

エルミット行列の固有値が実であることもまたこの定理からでてくる．もし，(22.19) の S と A がそれぞれユニタリーおよびエルミチアンならば，方程式は次のように書き直せる．

$$SAS^{\dagger}=A' \tag{22.23}$$

方程式 (22.23) のエルミット共役は，(22.16) から次のようになる．

$$SAS^{\dagger}=A'^{\dagger}$$

したがって，$A'^{\dagger}=A'$ となる．この結果は行列がエルミチアンであるという性質が，ユニタリー行列による変換を通じて保存されることを示している．もし，A' がエルミチアンであると同時に対角型であるならば，(22.15) から固有値は実数であることがわかる．この逆；すなわちユニタリー変換で必ず対角化され，実の固有値をもつ行列はエルミットである，ということも成立する．

次数無限大の行列については，A^{-1} が A の逆であるためには，方程式 (22.13) の両方が成立せねばならぬことは注意すべき重要な点である．同様に，もし A がユニタリーならば，方程式 (22.18) の後の組の両方共が成立しなければならない．

23. 変 換 理 論

量子力学の中に行列が現われてくることは，(8.2) の Schrödinger 方程式を解くことと簡単に関係づけることができる．この節では，**ハミルトニアン** ***Hamiltonian*** の記法を採用しているが，これについては，次の §24 で詳しくその正しいことを示すことにする．方程式 (8.2) を次のように書き直す．

$$Hu_k(\mathbf{r})=E_k u_k(\mathbf{r}) \tag{23.1}$$

ここで，添字 k は完全規格化直交系を作っているエネルギー固有関数 $u_k(\mathbf{r})$ の中のちがった一つ一つの関数およびそれに対応する固有値 E_k を指示している．つまり，k は

エネルギーを指定するばかりでなく，縮退した固有関数同志をも区別するものとする；たとえば，k は平面波の場合には k_x, k_y, k_z を表わし，三次元の調和振動子の場合は n_x, n_y, n_z を表わしている．

ハミルトニアンまたはエネルギー演算子 H は次式で与えられる．

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(\mathbf{r})=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r}) \tag{23.2}$$

ただし，この章を通じて V は実数と仮定しておくことにする．したがって E_k もまた実数である．§8の議論によって，k は離散的または連続的な変数であってよいし，あるいは（水素原子の場合のように）その区域の一部では離散的，残りの区域では連続的な変数であってもかまわない．添字 k の離散的な値についての和 $\sum_k$ とその区域の連続的な部分についての積分 $\int dk$ との両者に対する共通の記法として一般化された和の記号 S または S_k を用いることにする．なお，(23.2) のような演算子とそれと同等な行列とを区別することが望ましいと思われる場合には，添字 "op" を用いることにする．

23-1　ユニタリー行列 W

(23.1) の $u_k(\mathbf{r})$ 以外に，第二の完全規格直交関数系 $v_\mu(\mathbf{r})$ があるとしよう．ただし，$v_\mu(\mathbf{r})$ は実数固有値 ω_μ をもつある演算子 Ω の固有関数である．すなわち

$$\Omega v_\mu(\mathbf{r})=\omega_\mu v_\mu(\mathbf{r}) \tag{23.3}$$

Ω はたとえば (11.4) あるいは (11.11) の固有関数をもつ (11.3) の運動量演算子であってもよいし，あるいは何か (23.2) 以外のポテンシャルに対するハミルトニアンであってもよい．この v_μ は u_k を使って展開することができ，その展開係数を $w_{k\mu}$ とすると

$$v_\mu(\mathbf{r})=\mathsf{S}_k\, w_{k\mu}u_k(\mathbf{r}) \tag{23.4}$$

係数 $w_{k\mu}$ を求めるには，この方程式の両辺に $u_k^*(\mathbf{r})$ をかけて積分すればよい．即ち

$$w_{k\mu}=\int u_k^*(\mathbf{r})v_\mu(\mathbf{r})d^3r \tag{23.5}$$

(23.4) の方程式を得るためには関数系 u_k の完全性が，(23.5) の方程式を得るためにはその直交性が利用されたわけである．同様なやり方で，v_μ をつかって u_k を展開することもできて，その結果は次のようになる．

$$u_k(\mathbf{r})=\mathsf{S}_\mu\, w_{k\mu}^*v_\mu(\mathbf{r}) \tag{23.6}$$

ところで，$w_{k\mu}$ をその行列要素とする行列 W はユニタリーであることを，$WW^\dagger$ の代表的な行列要素を計算することによって証明することができる．すなわち

$$
\begin{aligned}
(WW^\dagger)_{kl} &= \mathsf{S}_\mu\, w_{k\mu} w_{l\mu}{}^* \\
&= \mathsf{S}_\mu \int u_k{}^*(\mathbf{r}) v_\mu(\mathbf{r}) d^3r \int v_\mu{}^*(\mathbf{r}') u_l(\mathbf{r}') d^3r' \\
&= \iint u_k{}^*(\mathbf{r}) \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') u_l(\mathbf{r}') d^3r d^3r' \\
&= \int u_k{}^*(\mathbf{r}) u_l(\mathbf{r}) d^3r
\end{aligned} \tag{23.7}
$$

ここでは任意の規格完全直交関数系のもつ完備性が利用されている．この性質は以前に（10.11）の方程式に関連して議論したことのあるもので，今の場合では次の形をとることになる．

$$
\mathsf{S}_\mu\, v_\mu(\mathbf{r}) v_\mu{}^*(\mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{23.8}
$$

方程式（23.7）の右辺の最後の積分は，k が添字の離散的な組の一つになっているか，連続的な組の一つになっているかによって Kronecker の δ 記号か Dirac の δ 関数かのいずれかになる．いずれにしても，この積分は単位行列の要素に同等であり，したがって $WW^\dagger = \mathbf{1}$. 同様なやり方で次の方程式も確かめることができる．

$$
(W^\dagger W)_{\mu\nu} = \mathsf{S}_k\, w_{k\mu}{}^* w_{k\nu} = (\mathbf{1})_{\mu\nu} \tag{23.9}
$$

23-2 W によるハミルトニアンの変換

今証明したように，W は二組の関数系 u_k と v_μ とを結びつけるユニタリー行列である．この W はまたハミルトニアン行列 H' を変換するのに利用することができる．この H' は，H_{op} を（23.2）の微分演算子として，次の行列要素をもつものとして定義されている．

$$
\begin{aligned}
H'_{kl} &= \int u_k{}^*(\mathbf{r}) H_{\mathrm{op}} u_l(\mathbf{r}) d^3r \\
&= E_k \delta_{kl} \quad \text{あるいは} \quad E_k \delta(k-l)
\end{aligned} \tag{23.10}
$$

この場合 H' はちょうどエネルギー固有値 E_k を対角要素にもつ対角行列になっている．このことを証明するのに方程式（23.1）が利用されている．関数系 v_μ を使えば次の行列要素をもつもう一つのハミルトン行列 H'' をつくることができる．

$$H''_{\mu\nu}=\int v_\mu{}^*(\mathbf{r})H_{\rm op}v_\nu(\mathbf{r})d^3r \tag{23.11}$$

この方は対角型になっていない.

ところで，(22.19) の定義にしたがって H'' を W で変換してみると，

$$(WH''W^\dagger)_{kl}=\mathrm{S}_\mu\,\mathrm{S}_\nu\, w_{k\mu}H''_{\mu\nu}w_{l\nu}{}^*$$

$$=\mathrm{S}_\mu\,\mathrm{S}_\nu\int u_k{}^*(\mathbf{r}')v_\mu(\mathbf{r}')d^3r'\int v_\mu{}^*(\mathbf{r})H_{\rm op}v_\nu(\mathbf{r})d^3r$$

$$\int v_\nu{}^*(\mathbf{r}'')u_l(r'')d^3r''$$

$$=\iiint u_k{}^*(\mathbf{r}')\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})H_{\rm op}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')u_l(\mathbf{r}'')d^3r'd^3rd^3r''$$

となる．ただし，$H_{\rm op}$ はその右側にくる変数 $\mathbf{r}$ にだけ作用する．$\mathbf{r}''$ についての積分は $H_{\rm op}$ を $\mathbf{r}''$-積分の外にとり出しておいて行なってよい．つまり

$$\int H_{\rm op}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')u_l(\mathbf{r}'')d^3r''=H_{\rm op}\int\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')u_l(\mathbf{r}'')d^3r''=H_{\rm op}u_l(\mathbf{r})$$

となり，結局次の結果を得る.

$$(WH''W^\dagger)_{kl}=\int u_k{}^*(\mathbf{r})H_{\rm op}u_l(\mathbf{r})d^3r=H'_{kl}$$

この結果は添字を具体的に使わずに行列方程式として次のように書いておいてもよい.

$$WH''W^\dagger=H' \tag{23.12}$$

つまりWは非対角行列 H'' を対角型の H' に変換するユニタリー行列であることがわかる；一方，$W^\dagger$ は H' を H'' に変換する.

以上でやってきたことのもう一つ別の見方として次のように言うことができる．すなわち，Schrödinger 方程式 (23.1) を解いてゆく過程は，ある特定の行列を対角化してゆく過程と完全に同等である．つまり，行列 H'' は方程式 (23.2) の演算子 $H_{\rm op}$ から何か都合のよい規格化完全直交関数系 $v_\mu(\mathbf{r})$ を使って計算されるものとしてよい．この H'' の対角化を完全に遂行することができるならば，エネルギー固有値 E_k で構成される対角型の H' と H'' を対角型にする W との両方がその過程の中で得られることになる．一旦 W がわかれば固有関数 $u_k(\mathbf{r})$ は方程式 (23.6) を使って求めることができる.

注意してよく見ると，Wは必ずしも正方行列である必要はないということは興味

がある；つまり，W の行と列は異なった仕方で標示されていてもよいということである．たとえば，関数系 u_k は完全に離散的な組をつくっている三次元調和振動子の固有関数であってもよく，一方関数系 v_μ は完全に連続的な一組をつくっている運動量固有関数であってもよいのである．ただしハミルトニアン行列 H' および H'' は共に正方行列である．

H' と H'' はそれらの固有値が実数である以上，エルミチアンであることは明らかである．§10 の議論から生じた解釈によれば，ある物理的に測定可能な量を表わしている演算子の固有値は，それらがその量の正確な測定についての唯一の可能な結果であるというからには，実数である．要するに，物理的に測定可能な力学変数は，対角型になっているときにはエルミット行列によって表わされるということになる．さらに，方程式（22.23）の議論を使えば，この行列を任意のユニタリー行列で変換したものもやはりエルミチアンになることが結論される．

23-3 U によるハミルトニアンの変換

方程式（23.2）で与えられている演算子Hを，方程式（23.10）および（23.11）で定義されている行列 H' および H'' と根本的に異なった性状のものと考える必要はない．H_{op} に対する行列の自然な形は，座標 $\mathbf{r}$ および $\mathbf{r}'$ で行と列が標識されている形式である．これに対応する単位行列としては，方程式（23.7）の右辺で k が添字の連続的な組の一つになっている場合の類推から，次の形のものを採用する．

$$(1)_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

この場合，対角行列は $f(\mathbf{r})\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ と書くことができる．ただし f は微分演算子ではなく何か $\mathbf{r}$ の乗数関数で，たとえばポテンシャルエネルギーのようなものでもよい．そうすればハミルトニアン演算子の行列の形は次のようになることが予想される．

$$H_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}=H_{op}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{23.13}$$

ただし，右辺の H_{op} は変数 $\mathbf{r}$ だけに作用するものである．添字が明示されていないときの H はいつもこの行列を指すものとする．H_{op} が乗数関数ではなくその運動エネルギーの部分に微分演算子を含んでいる以上，$H_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ は対角型にはなっていないということは注意すべき重要なことである．つまり（23.13）は対角線 $\mathbf{r}=\mathbf{r}'$ から無限小だけずれている零でない行列要素をもっているのである．

方程式 (23.12) は W が H' を H'' に変換することを示している．そこで，(23.13) で定義される H を H' に変換するユニタリー行列はどんなものかを問題にすることは興味がある．つまり，

$$UHU^\dagger = H' \tag{23.14}$$

この方程式は $HU^\dagger = U^\dagger H'$ と書くこともでき，さらにこれを行列要素で書き表わした場合は，$(HU^\dagger)_{\mathbf{r}k} = (U^\dagger H')_{\mathbf{r}k}$ あるいは

$$\mathsf{S}_{\mathbf{r}'}\, H_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(U^\dagger)_{\mathbf{r}'k} = \mathsf{S}_l\, (U^\dagger)_{\mathbf{r}l} H'_{lk} \tag{23.15}$$

となる．ここで $\mathsf{S}_{\mathbf{r}'}$ は $\int d^3r'$ に他ならない．(23.15) に (23.13) を代入すると，(23.15) の左辺は次のようになる．

$$\int H_{\text{op}}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')(U^\dagger)_{\mathbf{r}'k} d^3r' = H_{\text{op}}\int \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')(U^\dagger)_{\mathbf{r}'k} d^3r'$$
$$= H_{\text{op}}(U^\dagger)_{\mathbf{r}k}.$$

ただし，H_{op} は $(U^\dagger)_{\mathbf{r}k}$ 中の $\mathbf{r}$ を含む部分にだけ作用する．(23.15) の右辺は (23.10) を使って書き直すことができ，その結果は $(U^\dagger)_{\mathbf{r}k}E_k$ となる．結局 (23.15) の方程式は次の方程式と同等である．

$$H_{\text{op}}(U^\dagger)_{\mathbf{r}k} = E_k(U^\dagger)_{\mathbf{r}k}$$

Schrödinger 方程式 (23.1) と比較してみればわかるように，$(U^\dagger)_{\mathbf{r}k}$ はエネルギー固有関数 $u_k(\mathbf{r})$ と同一視されるべきものである．

このようにして，規格直交完全系をつくる関数 $u_k(\mathbf{r})$ を

$$U_{k\mathbf{r}} = u_k^*(\mathbf{r}) \tag{23.16}$$

という一つのユニタリー行列 U と見なすことが許されるような理論形式の一つの拡張に自然に導かれることになる．この特殊な場合では，(23.14) にしたがって U は H を H' に変換しているが，U が実際ユニタリーであることは容易に証明される．たとえば，u_k の規格直交性によって

$$(UU^\dagger)_{kl} = \mathsf{S}_{\mathbf{r}}\, U_{k\mathbf{r}}(U^\dagger)_{\mathbf{r}l} = \int u_k^*(\mathbf{r})u_l(\mathbf{r})d^3r = (\mathbf{1})_{kl}$$

さらに完備性によって

$$(U^\dagger U)_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \mathsf{S}_k\, (U^\dagger)_{\mathbf{r}k}U_{k\mathbf{r}'} = \mathsf{S}_k\, u_k(\mathbf{r})u_k^*(\mathbf{r}') = (\mathbf{1})_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$$

23-4 V によるハミルトニアンの変換

方程式 (23.16) によれば，関数系 $v_\mu(\mathbf{r})$ もやはり

$$V_{\mu\mathbf{r}}=v_\mu{}^*(\mathbf{r})$$

という一つのユニタリー行列と見なすことができる．この場合にもまたVのユニタリー性は $v_\mu(\mathbf{r})$ の全体の規格直交性と完備性から導かれる．そして期待通りVによるHの変換はH''を与えることになる．

$$VHV^\dagger=H'' \tag{23.17}$$

この方程式の両辺の $\mu\nu$ 行列要素はちょうど (23.11) の両辺になっている．

(23.14) と (23.17) の二つの方程式から次のようにして行列Hを消去することができる

$$H=V^\dagger H''V$$

$$H'=UHU^\dagger=UV^\dagger H''VU^\dagger$$

この最後の方程式は

$$W=UV^\dagger \tag{23.18}$$

とおけば (23.12) と一致する．行列要素の関係としては

$$(W)_{k\mu}=\mathop{\mathrm{S}}_{\mathbf{r}} U_{k\mathbf{r}}(V^\dagger)_{\mathbf{r}\mu}$$

あるいは

$$w_{k\mu}=\int u_k{}^*(\mathbf{r})v_\mu(\mathbf{r})d^3r$$

で，これは (23.5) に他ならない．(23.18) の方程式はまた $V^\dagger=U^\dagger W$ および $U^\dagger=V^\dagger W^\dagger$ という形に書くことができるが，これらはそれぞれ (23.4) および (23.6) に他ならない．

23-5 演算子の表示

三種のハミルトニアンの行列 H, H', H'' は，同一の演算子 H_{op} の異なった表示 ***representation*** に帰せられるものといわれている．行列の行および列の標識にその固有値が用いられている物理量 ($\mathbf{r}, E_k, \omega_\mu$, もっと簡略に $\mathbf{r}, k, \mu$) が，それぞれの特定の表示を指定するのである．つまり H, H', H'' はそれぞれ座標表示，エネルギー表示，Ω表示でのハミルトニアンなのである．その行および列がそれぞれ物理量AおよびBの固有値の標識をもつユニタリー行列は，B表示からA表示へ演算子を変換する．たとえば，

Uは任意の演算子を座標表示からエネルギー表示へ変換し，$U^{\dagger}$は逆にエネルギー表示から座標表示へ変換する．同様にVは座標表示からΩ表示へ変換し，WはΩ表示からエネルギー表示へ変換する．したがって，まずVを作用させてから次にWを作用させるということは，まず座標表示からΩ表示に変換しそれから次にエネルギー表示に変換するということである．このときの全体としての効果は積行列WVで表わされるが，それは一番右にきている変換が一番最初に作用することになるからである．ところで方程式（23.18）によれば$WV=U$となっているが，これはUが座標表示からエネルギー表示への変換である以上当然のことである．ある演算子は，その当の演算子の固有値を行および列の標識とする表示では対角型になる；つまり，H'が対角型であるのは，それがエネルギー表示でのハミルトニアンであるからである．

以上のパラグラフで注意した点は，それらを演算子Ωに適用して具体的に示すことができる．まず座標表示でΩは次の形をもつことが予想される．

$$\Omega_{\mathbf{rr}'}=\Omega_{\mathrm{op}}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{23.19}$$

ただし，右辺のΩは変数$\mathbf{r}$だけに作用する．この行列をΩとよぶことにして，次にΩのエネルギー表示への変換を求めよう．それは$U\Omega U^{\dagger}$になるはずであるが，実際

$$(U\Omega U^{\dagger})_{kl}=\mathsf{S}_{\mathbf{r}}\,\mathsf{S}_{\mathbf{r}'}\,U_{k\mathbf{r}}\Omega_{\mathbf{rr}'}(U^{\dagger})_{\mathbf{r}'l}$$
$$=\int u_k{}^*(\mathbf{r})\Omega_{\mathrm{op}}u_l(\mathbf{r})d^3r$$

と予想通りの結果を得る．同様にΩ表示への変換の結果は

$$(V\Omega V^{\dagger})_{\mu\nu}=\omega_{\mu}(\mathbf{1})_{\mu\nu}$$

という対角型になる．

23-6 便利な一つの恒等式

ある任意の関数$\psi_{\beta}(\mathbf{r})$について，方程式（23.19）を使って次のように書くことができる．

$$\Omega_{\mathrm{op}}\psi_{\beta}(\mathbf{r})=\int\Omega_{\mathbf{rr}'}\psi_{\beta}(\mathbf{r}')d^3r'$$

$\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$をもう一つの任意関数とすれば，これから

$$\int\psi_{\alpha}{}^*(\mathbf{r})[\Omega_{\mathrm{op}}\psi_{\beta}(\mathbf{r})]d^3r=\iint\psi_{\alpha}{}^*(\mathbf{r})\Omega_{\mathbf{rr}'}\psi_{\beta}(\mathbf{r}')d^3rd^3r' \tag{23.20}$$

ここでは必ずしも $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ がある規格化完全直交関数系の一員であると仮定しているわけではない．ところで $\Omega_{\mathbf{rr}'}$ は $\mathbf{r}$ および $\mathbf{r}'$ を行および列の標識とする一つの行列であり，したがって演算子 Ω_{op} そのものではないから，方程式（23.20）の右辺で項をならべかえてやることができ，その結果

$$\int\left[\int(\Omega^\dagger)_{\mathbf{r}'\mathbf{r}}\psi_\alpha(\mathbf{r})d^3r\right]^*\psi_\beta(\mathbf{r}')d^3r'$$

となる．ただし $(\Omega^\dagger)_{\mathbf{r}'\mathbf{r}}$ は Ω のエルミット共役行列 $\Omega^\dagger$ の $\mathbf{r}',\mathbf{r}$ 要素すなわち $\Omega^*_{\mathbf{rr}'}$ である．ここでもう一度（23.19）を使って，Ω_{op} のエルミット共役演算子 $\Omega_{\mathrm{op}}{}^\dagger$ を

$$\Omega_{\mathrm{op}}{}^\dagger\psi_\alpha(\mathbf{r})=\int(\Omega^\dagger)_{\mathbf{rr}'}\psi_\alpha(\mathbf{r}')d^3r'$$

によって定義することができる．その結果，方程式（23.20）は次の形に書き直してよいことになる．

$$\int\psi_\alpha{}^*(\mathbf{r})[\Omega_{\mathrm{op}}\psi_\beta(\mathbf{r})]d^3r=\int[\Omega_{\mathrm{op}}{}^\dagger\psi_\alpha(\mathbf{r})]^*\psi_\beta(\mathbf{r})d^3r \qquad (23.21)$$

方程式（23.21）は使ってみて便利な場合が少なくない．というのは，このタイプの積分で，Ω_{op} が関数 ψ_α,ψ_β のどちらか一つに作用するときが他の一方に作用するときに比べて計算が都合よくできるということがありうるからである．（7.9），（7.10）および（12.3）の各方程式における部分積分は方程式（23.21）の応用の実例である．これらの場合では，Ω_{op} は微分演算子になっており，その座標表示は $\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ の微係数を含んでいる．しかしながら，Ω_{op} としてはこの種の特殊なタイプのものに限られる必要はなく，有限の $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ に対して零でない行列要素をもつことがあってもよい．いずれにしても，もしも Ω_{op} が物理的に測定可能な力学変数を表わすべきものであるとすれば，Ω_{op} はエルミチアンでなければならず，その場合には $\Omega_{\mathrm{op}}{}^\dagger$ は方程式（23.21）の右辺の Ω_{op} で置き換えることができる．

23-7 一行および一列の行列

これまで取り扱われてきているのは，力学変数を表わし多くの場合エルミチアンである H や Ω のような正方行列および一つの表示からもう一つの表示への変換を表わしユニタリーである U, V, W のような直方行列である．ある系の一つの特定の状態 α は関数 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ で表わすことができるが，この $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ のような関数は $\mathbf{r}$ をその行の標識と

する一列の行列を考えることもできる；ただし，すぐ上で注意したように，α は一つの完全な関数系の標識になっている必要はなく．ある特定の α それだけを考えておいてよいのである．$u_k(\mathbf{r})$ は一つの完全系をつくっているから，ψ_α は u_k を使って展開することができる：

$$\psi_\alpha(\mathbf{r})=\mathrm{S}_k\, a_{\alpha k}u_k(\mathbf{r}) \qquad (23.22)$$

ただし，係数 $a_{\alpha k}$ は次式によって与えられる．

$$a_{\alpha k}=\int u_k^*(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r})d^3r \qquad (23.23)$$

これらの方程式はそれぞれ次のように行列の形式で書くこともできる．

$$\psi_\alpha=U^\dagger a_\alpha \quad \text{および} \quad a_\alpha=U\psi_\alpha \qquad (23.24)$$

ただし，a_α は k をその行の標識とする一列の行列である．つまり，U が (23.14) によって H のような一つの演算子を座標表示からエネルギー表示へ変換することになるのと全く同様に，U はまた (23.24) の第二の方程式によって一つの状態関数を座標表示からエネルギー表示へ変換することになるのである．

同様に $v_\mu(\mathbf{r})$ を使った展開式

$$\psi_\alpha(\mathbf{r})=\mathrm{S}_\mu\, b_{\alpha\mu}v_\mu(\mathbf{r}) \quad \text{および} \quad b_{\alpha\mu}=\int v_\mu^*(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r})d^3r$$

を次のような行列の形式に書くことができる．

$$\psi_\alpha=V^\dagger b_\alpha \quad \text{および} \quad b_\alpha=V\psi_\alpha \qquad (23.25)$$

方程式 (23.22), (23.23) および (23.18) を組み合わせると次の結果が得られる．

$$a_\alpha=U\psi_\alpha=UV^\dagger b_\alpha=Wb_\alpha$$

結局，W は状態関数を Ω 表示 b_α からエネルギー表示 a_α へ変換するという予想通りの結果になる．

ユニタリー変換の一つの重要な性質は，ある状態関数の***ノルム norm*** を不変にするということである．座標表示ではノルムは規格化積分に他ならないが，それはまた次のように書くことができる．

$$\int\psi_\alpha^*(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r})d^3r=\mathrm{S}_\mathbf{r}\,\psi_\alpha^*(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r})=\psi_\alpha^\dagger\psi_\alpha$$

この右辺は，ψ_α のエルミット共役で座標 $\mathbf{r}$ を行の標識とする一行の行列 $\psi_\alpha^\dagger$ と一列の行列 ψ_α との行列としての積である．この積の結果は一行一列の行列，つまり単に一

つの数になる．ノルムは実数で負にならないことは明らかである．方程式（23.24）を利用してノルムを次のように書き直すこともできる．

$$\psi_\alpha{}^\dagger\psi_\alpha = a_\alpha{}^\dagger UU^\dagger a_\alpha = a_\alpha{}^\dagger a_\alpha$$

これは $S_k\,|a_{\alpha k}|^2$ に等しい．同様なやり方で $\psi_\alpha{}^\dagger\psi_\alpha = b_\alpha{}^\dagger b_\alpha$ となり，結局この状態関数の三種の表示はすべて同一のノルムをもつもとになる．それに対してノルムが存在する（すなわち無限大にならない）状態関数はそれを $(\psi_\alpha{}^\dagger\psi_\alpha)^{1/2}$ で割ってやることによって**規格化する** *normalized* ことができる．規格化されている場合，状態関数のノルムは1に等しくなる．

（23.21）の恒等式は，状態関数 ψ_α および ψ_β の座標表示の行列の形式を使って書き直してみれば

$$\psi_\alpha{}^\dagger\Omega\psi_\beta = (\Omega^\dagger\psi_\alpha)^\dagger\psi_\beta$$

となり，これが正しいことは自明になるということを注意しておくのは興味がある．つまり，方程式（22.16）からわかるように，この両辺は同一になるからである．行列としての積の構造は，両辺ともそれぞれ一行一列の行列，したがって一つの数になっているわけである．

23-8 ヒルベルト空間

ψ_α, a_α または b_α のような一つの状態関数を無限次元の**ヒルベルト空間**[1] *Hilbert space* 内の一つの**状態ベクトル** *state vector* とみなす幾何学的な見方がしばしば利用される．この空間の各次元はその状態を記述する一列の行列の行の中の一つに対応しており，ヒルベルト空間のその軸の方向での状態関数の成分はそれに対応する行列要素と数値的に等しい．ヒルベルト空間における座標軸の向きの選び方の相異は，表示に対する選び方の相異に対応する．たとえば，エネルギー表示はこれらの座標軸の一つの方向をその向きにもつ状態ベクトルがハミルトニアンの一つの固有状態になっているような工合に軸を選ぶことに対応している．より一般的な言い方をすれば，ベクトル a_α はエネルギー固有値 E_k に対応している軸の方向に成分 $a_{\alpha k}$ をもっているのである．

ある状態関数のノルムはヒルベルト空間においてそれに対応している状態ベクト

1) R. Courant and D. Hilbert "Methods of Mathematical Physics" Vol. I, p. 55 (Interscience, New York, 1953); P. R. Halmos, "Introduction to Hilbert Space" (Chelsea, New York, 1957) の第 I 章

ルの長さの自乗に他ならない．ただしここでのベクトルの“長さ”は，その成分が複素数であってもよいということを考慮に入れて適当に拡張されている．ノルムは，

$$(\psi_\alpha, \psi_\beta) = \psi_\alpha{}^\dagger \psi_\beta = \int \psi_\alpha{}^*(\mathbf{r}) \psi_\beta(\mathbf{r}) d^3r \tag{23.26}$$

として定義され，やはり一つの数である二つの状態ベクトル ψ_α および ψ_β の**内積** ***inner product*** の一つの特別の場合になっている．つまり，(23.26) で α と β が同一の状態である場合，この内積がノルムに等しいのである．内積が零になる場合，二つの状態ベクトルは**直交している** ***orthogonal*** といわれる．これらの状態ベクトルをエネルギー表示および Ω 表示で表わしたときの内積はそれぞれ

$$(a_\alpha, a_\beta) = a_\alpha{}^\dagger a_\beta \quad \text{および} \quad (b_\alpha, b_\beta) = b_\alpha{}^\dagger b_\beta$$

となる．内積はノルムと同様に表示によらないことは (23.24) および (23.25) の方程式から明らかである．一つの表示からもう一つの他の表示へのユニタリー変換は，状態ベクトルには変化のないヒルベルト空間内での**座標軸の回転** ***rotation of axes*** に対応していることも明らかである．ある特定の状態ベクトルは異なった座標軸を基準にした場合異なった成分をもち，これらの異なった成分はその状態の異なった表示を構成しているのである．

さらに，ψ_β に Ω_{op} を作用させるということは状態ベクトル ψ_β がもう一つの状態ベクトル $\Omega\psi_\beta$ になるような ψ_β の変換を行なうことになる．この種の変換をヒルベルト空間内での**状態ベクトルの一般化された回転** ***generalized rotation of the state vector*** ということにする．“一般化された”という言葉はこの回転が純粋の回転と同時に成分を引きのばしたりちぢめたりすることを含むことを示しているのである；特に，一般化された回転は状態ベクトルのノルムを保存しないのが普通である．このように考えれば，行列要素 $\psi_\alpha{}^\dagger \Omega \psi_\beta = (\psi_\alpha, \Omega\psi_\beta)$ は状態ベクトル ψ_α と $\Omega\psi_\beta$ との内積であり，それが表示によらないことは容易に示される．

23-9 Dirac のブラおよびケット記法

この節で説明した変換理論は，Dirac によって発明された記法を利用すると極めて簡潔な形式にまとめることができる．[1] ある状態関数すなわち状態ベクトルが ψ_α, a_α ある

1) P. A. M. Dirac, "The Principles of Quantum Mechanics" (Oxford, New York, 1958) 第4版（邦訳，前掲）の第6章を見よ．

いは b_α のどれで表わされていようと，それを一つの**ケット** *ket* あるいは**ケットベクトル** $|\alpha\rangle$ で書き表わし，そのエルミット共役状態 $\psi_\alpha^*, a_\alpha^*$ あるいは $b_\alpha^\dagger$ を一つの**ブラ** *bra* あるいは**ブラベクトル** *bra vector* $\langle\alpha|$ で書き表わすのである．二つの状態ベクトルの内積は

$$\psi_\alpha^\dagger\psi_\beta=\langle\alpha|\beta\rangle$$

と書かれ，括弧式とよばれる．これは一つの数である。括弧（ブラケット）（*bracket*）の初めの三つの文字と後の三つの文字が上の二種の状態ベクトルの名前の由来になっている．

あるケットベクトルに左から Ω を作用させると，もう一つの別のケットベクトルがつくられる．

$$\Omega|\beta\rangle=|\beta'\rangle \tag{23.27}$$

また，あるブラベクトルに右から Ω を作用させると，もう一つの別のブラベクトルがつくられる．

$$\langle\alpha|\Omega=\langle\alpha''|$$

状態 α と状態 β との間の Ω の行列要素は次の同等ないろいろな形式のどれか一つで書くことができる．

$$\begin{aligned}\Omega_{\alpha\beta}&=\int\psi_\alpha^*(\mathbf{r})\Omega\psi_\beta(\mathbf{r})d^3\boldsymbol{r}\\&=\int[\Omega^\dagger\psi_\alpha(\mathbf{r})]^*\psi_\beta(\mathbf{r})d^3\boldsymbol{r}\\&=(\psi_\alpha,\Omega\psi_\beta)=(\Omega^\dagger\psi_\alpha,\psi_\beta)\\&=\langle\alpha|\beta'\rangle=\langle\alpha''|\beta\rangle=\langle\alpha|\Omega|\beta\rangle\end{aligned} \tag{23.28}$$

これらの中，最も普通に用いられている記法は最初と最後のものである．エルミット共役演算子 $\Omega^\dagger$ の行列要素は (22.13) にしたがって次式で与えられる．

$$(\Omega^\dagger)_{\beta\alpha}=\Omega_{\alpha\beta}^*=\langle\beta|\Omega^\dagger|\alpha\rangle=\langle\alpha|\Omega|\beta\rangle^*$$

(23.27) および (23.28) の一例の特殊な場合として Ω が単位演算子の場合がある．

$$\langle\alpha|\mathbf{1}|\beta\rangle=\langle\alpha|\beta\rangle$$

ψ_α を u_k, ψ_β を v_μ とみなせば，この方程式を使って (23.5) のユニタリー行列 W に対する次の括弧式が得られる．

$$w_{k\mu}=\langle k|\mu\rangle=\langle\mu|k\rangle^* \tag{23.29}$$

以上でこの節の種々の基本方程式を Dirac の記法に書き直すための準備が一応

ととのったわけである．この節で用いてきた三種の表示を三種のケットの完全系 $|k\rangle$, $|\mu\rangle$ および $|\mathbf{r}\rangle$ で指定することにしよう．$|k\rangle$ は固有値 E_k をもつ一つのエネルギー固有状態であり，$|\mu\rangle$ は固有値 ω_μ をもつ Ω の一つの固有状態であるわけだが，それと全く同じ意味で $|\mathbf{r}\rangle$ は固有値 $\mathbf{r}$ をもつ一つの座標の固有状態である（第III章の問題2と比較せよ）．そうすれば，(23.28) との類推で (23.16) の方程式は次のような形式に書けることになる．

$$\langle k|\mathbf{r}\rangle = u_k^*(\mathbf{r}) \quad \text{および} \quad \langle \mathbf{r}|k\rangle = u_k(\mathbf{r}) \tag{23.30}$$

同様に

$$\langle \mu|\mathbf{r}\rangle = v_\mu^*(\mathbf{r}) \quad \text{および} \quad \langle \mathbf{r}|\mu\rangle = v_\mu(\mathbf{r}) \tag{23.31}$$

とも書くことができる．ここでもう一度 ψ_α を u_k と考えれば，

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|a\rangle, \qquad a_{\alpha k} = \langle k|\alpha\rangle, \qquad b_{\alpha\mu} = \langle \mu|\alpha\rangle \tag{23.32}$$

となる．

ある与えられた表式中に二回（一回はケットの位置にもう一回はブラの位置に）現われている状態を指定する記号はどんなものでも状態の規格完全直交系についての和がとられていると仮定するという規約を以下では採用することにする．；つまり，

$$\mathrm{S}_\mu \cdots |\mu\rangle\langle\mu| \cdots \tag{23.33}$$

という形の表式から S_k という記号ははぶかれることになる．以下の書き直された方程式の番号は，それらの元の方程式の番号に ′ をつけた番号にしてある．

$$\Omega|\mu\rangle = \omega_\mu|\mu\rangle \quad \text{or} \quad \langle \mathbf{r}|\Omega|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|\mu\rangle = \omega_\mu\langle \mathbf{r}|\mu\rangle \tag{23.3′}$$

$$|\mu\rangle = |k\rangle\langle k|\mu\rangle \quad \text{or} \quad \langle \mathbf{r}|\mu\rangle = \langle \mathbf{r}|k\rangle\langle k|\mu\rangle \tag{23.4′}$$

$$\langle k|\mu\rangle = \langle k|\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}|\mu\rangle \tag{23.5′}$$

$$|k\rangle = |\mu\rangle\langle \mu|k\rangle \quad \text{or} \quad \langle \mathbf{r}|k\rangle = \langle \mathbf{r}|\mu\rangle\langle \mu|k\rangle \tag{23.6′}$$

$$\langle k|\mu\rangle\langle \mu|l\rangle = \langle k|\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}|l\rangle = \langle k|l\rangle \tag{23.7′}$$

$$\langle \mathbf{r}|\mu\rangle\langle \mu|\mathbf{r}'\rangle = \langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle \tag{23.8′}$$

$$\langle \mu|k\rangle\langle k|\nu\rangle = \langle \mu|\nu\rangle \tag{23.9′}$$

$$\langle k|H|l\rangle = E_k\langle k|l\rangle \tag{23.10′}$$

$$\langle k|\mu\rangle\langle \mu|H|\nu\rangle\langle \nu|l\rangle = \langle k|H|l\rangle \tag{23.12′}$$

$$\langle \mathbf{r}|H|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|k\rangle = \langle \mathbf{r}|l\rangle\langle l|H|k\rangle \tag{23.15′}$$

$$\langle \mu|\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}|H|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|\nu\rangle = \langle \mu|H|\nu\rangle \tag{23.17′}$$

$$\langle k|\mu\rangle=\langle k|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\mu\rangle \tag{23.18'}$$

$$\langle\mathbf{r}|\alpha\rangle=\langle\mathbf{r}|k\rangle\langle k|\alpha\rangle \tag{23.22'}$$

$$\langle k|\alpha\rangle=\langle k|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\alpha\rangle \tag{23.23'}$$

$$\langle\mathbf{r}|\alpha\rangle=\langle\mathbf{r}|\mu\rangle\langle\mu|\alpha\rangle \quad \text{および} \quad \langle\mu|\alpha\rangle=\langle\mu|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\alpha\rangle \tag{23.25'}$$

$$\langle\alpha|\beta\rangle=\langle\alpha|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\beta\rangle \tag{23.26'}$$

方程式 (23.3′) および (23.10′) はそれぞれ Ω および H に対する固有値方程式になっているが，この二つを除けばこれらの方程式はすべての次のような一つの性質を共通にもっている．つまり (23.33) の場合のように状態の規格完全直交系についての和をとっているものと諒解されている繰り返して現われる状態の記号 (k, μ または $\mathbf{r}$) のところを単位演算子に同等なものと仮定することにすれば，これらの方程式はすべて自明の恒等式になってしまうのである．たとえば，方程式 (23.15′) の左辺および右辺で $|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|$ および $|l\rangle\langle l|$ をそれぞれ単位演算子で置き換えてよいとするならば，この方程式の両辺はそれぞれに $\langle\mathbf{r}|H|k\rangle$ に等しいことになる．明らかにこの種の置き換えは，任意の規格完全直交の関数系の完備性を利用していることと同等である．またこれとは逆に，(23.4′) の左辺から右辺へ移行する際のように，このような意味での単位演算子はいつでも挿入することができる．この種の仮定の正しさの最も簡単な証明は，このような繰り返される状態記号の除去または挿入ということは常に正しい方程式を導くということが見られているという点にある．

注意すべきことは，挿入ということは二つの演算子の間ででも行なうことができるという点である．

$$\Omega\Gamma=\Omega|k\rangle\langle k|\Gamma \tag{23.34}$$

23-10 射影演算子

次の方程式を考えよう．

$$|\alpha\rangle=\mathsf{S}_\mu\,|\mu\rangle\langle\mu|\alpha\rangle=\mathsf{S}_\mu\,P_\mu|\alpha\rangle \tag{23.35}$$

この右辺の演算子 P_μ は単一の状態 μ に対して，つまり一般化された和の規約を適用しないとして次のように定義されている．

$$P_\mu\equiv|\mu\rangle\langle\mu| \tag{23.36}$$

(23.3′) の最初の式から明らかなように，$P_\mu|\alpha\rangle$ は固有値 ω_μ をもつ Ω の一つの固有

状態である．したがって任意のケット $|\alpha\rangle$ を方程式 (23.35) によって任意の演算子 Ω の固有状態の一般化された和として書くことができるのである．この演算子 P_μ は**射影演算子** *projection operator* とよばれている．というのはそれが $|\alpha\rangle$ の中から Ω のある特定の固有状態になっている部分をとり出しているからである．

今度は Ω は区別できる固有値としては二つだけの値 ω_1 と ω_2 しかもたず，それぞれの固有値は極めて強く縮退しているものとしよう．実例としては固有値 ±1 をもつ偶奇性の演算子とか，固有値 $\pm\frac{1}{2}\hbar$ をもつスピン $\frac{1}{2}$ 粒子のスピン角運動量の一成分とかいったものである (次の章を見よ)．このような事情があるときには，任意の状態 $|\alpha\rangle$ をそれぞれが固有値 ω_1 および ω_2 をもつ Ω の一つの固有値になっているような二つの部分の和として書いておくのが都合がよい場合が少なくない．このことは次の方程式で射影演算子を定義することによって実行することができる．

$$P_i \equiv \mathsf{S}_{\mu=\mu_i} P_\mu \tag{23.37}$$

ただしここでは (23.36) とは異なって $i=1,2$ になっている．この場合 $P_i|\alpha\rangle$ は固有値 ω_i をもつ Ω の一つの固有状態になっている．容易に証明されるように

$$P_1 = \frac{\Omega-\omega_2}{\omega_1-\omega_2} \quad \text{および} \quad P_2 = \frac{\Omega-\omega_1}{\omega_2-\omega_1} \tag{23.38}$$

さらに

$$\sum_i P_i = 1, \qquad P_i P_j = \delta_{ij} P_i \tag{23.39}$$

が成立する．

Ω が互いに区別される 2 個以上の固有値をもっているような場合に対しても (23.38) を一般化することができる．(23.37) の定義をとれば，今度の場合は

$$P_i = \prod_{j\neq i} \frac{\Omega-\omega_j}{\omega_i-\omega_j} \tag{23.40}$$

となる．(23.39) の方程式はこの場合にもやはり成立する．

Ω はエルミチアンであるから，その固有値 ω_μ は実数で，P_μ および P_i は明らかにエルミチアンになる．最後に，$|\mu\rangle$ を離散的固有値に対応する規格化された固有状態とすれば，$\mathrm{tr}(P_\mu)=1$ になることは容易に証明される．この場合，$\mathrm{tr}(P_i)$ は固有値 ω_i をもつ Ω の一次独立な固有状態の個数に等しい；つまりそれは ω_i に対応するヒルベルト空間の部分空間の次元数に等しいのである．

§42 において射影演算子についてさらに議論をする機会があるはずである．

23-11 行列要素の物理的意味

すでに説明しておいたように，ある演算子の対角化された行列の対角要素はその演算子の固有値に他ならない．演算子が対角型になっていない場合には，行列の対角要素は演算子の規約化された状態に対する期待値になっていることは，§7の議論と比較して見ればわかる．より一般的な言い方をすれば，$\langle\alpha|\Omega|\alpha\rangle/\langle\alpha|\alpha\rangle$ は規約化可能なケット $|\alpha\rangle$ で表わされる状態に対する演算子 Ω の期待値である．

これまでのところでは，$\langle\alpha|\Omega|\beta\rangle$ のような対角線からはずれた要素に対しては簡単な解釈がなかった．この種の非対角要素については，他にもいろいろなことがあるにしても，一応それらは一対の状態間の遷移に対する確率に関連していることが第VIII章で明らかになるはずである．

24□運 動 方 程 式

前節で説明した変換理論は力学とは何らかかわりをもっていない；つまりそれはある時刻における物理系の記述を取り扱っている．この記述はその対象として次の三種類のものを含んでいる．第一に記述の対象になるのは，ある特定の時刻におけるその系の状態を指定するものである．この種のものは場合に応じて，状態関数 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ として；列行列 ψ_α, a_α または b_α として；ヒルベルト空間のベクトルとして；ケット $|\alpha\rangle$ として書き表わされる．これらの表現のそれぞれに対応して $\psi_\alpha^\dagger$ とか $\langle\alpha|$ とかいうようなエルミット共役量がある．第二の種類の対象としてユニタリー変換がある．これはUのような直方行列として書き表わすことができ，その行列要素は $\langle k|\mathbf{r}\rangle$ というような括弧式になる．この種のものは一つの表示から他の表示への変換を生じるものであるが，ヒルベルト空間の立場からみればそれは状態は変化させないで空間の基軸を回転させることになり，その結果ある特定の状態ベクトルは前とは異なった一組の基軸によって指定される．第三の種類の対象としてΩといったような力学変数がある．この種のものは演算子として，あるいは正方行列として書き表わすことができる．この種の行列の要素はヒルベルト空間のある特定の基軸の組に関して計算することができ，ある基軸系でのそれらの値はユニタリー行列によって他の基軸系での値に変換される。たとえばUは $|\alpha\rangle$ を座標表示 $\langle\mathbf{r}|\alpha\rangle$ からエネルギー表示 $\langle k|\alpha\rangle$ へ変換するものであるが，同時にそれ

はΩを座標表示 $\langle \mathbf{r}|\Omega|\mathbf{r}'\rangle$ からエネルギー表示 $\langle k|\Omega|l\rangle$ へ変換するのである.

別の言い方をすれば，Ωの行列要素は幾つかの特定の状態ベクトル ψ_α に関して計算することができる．これらの状態ベクトルはある完全系のメンバーである必要はなく，それらについての行列要素は内積 $(\psi_\alpha, \Omega\psi_\beta)=\langle\alpha|\Omega|\beta\rangle$ としてユニタリー変換に関して不変になっている；すなわち，その数値は表示の選び方（ヒルベルト空間の基軸の選び方）にはよらないのである．Ωをケット $|\beta\rangle$ に作用させた結果は新しいケット $\Omega|\beta\rangle$ になるが，この新しいケットと元の $|\beta\rangle$ とは，ヒルベルト空間における状態ベクトルの一般化された回転によって結びつけられている．もしもたまたま $|\beta\rangle$ がΩの一つの固有状態 $|\mu\rangle$ であるとすれば，このときの“回転”とは，その状態ベクトルの大きさを変えないで単にそれを ω_μ 倍することになる.

状態ベクトルを変化させないヒルベルト空間での基軸の回転はユニタリー変換によって生じる．一方，基軸を変化させない状態ベクトルの一般化された回転は，力学変数によって生じる．この両者の区別ははっきりさせておかねばならないことである.

この節では，ある物理系がある時刻から他の時刻へと変化してゆくその仕方を考える．以下に示すように，この時間による変化を，状態ベクトルにおこる変化として，あるいは力学変数におこる変化として，あるいは双方にまたがる変化として，といったいろいろな見方から見ることができる．いずれにしても，量子論での運動方程式がハミルトニアンを使う古典論の運動方程式の形式と極めてよく似た形になるような一つの特定の見方が存在するということになるのである．この種の相似性は，適当な近似において同一系に対する古典論の方程式と一致する量子論の方程式を考え出すための，ある程度一般的な方法を示唆しているのである.

24-1 Schrödinger 流の見方

出発点として（6.16）の時間を含む Schrödinger 方程式をとり，それを時間に関係するケット $|\alpha_S(t)\rangle$ とハミルトニアン H を使って書くことにする.

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\alpha_S(t)\rangle=H|\alpha_S(t)\rangle \tag{24.1}$$

ここで時間についての全微分が用いられているのは，このケットの座標あるいはその他の変数に対する依存関係はおもてには現われないからである．添字の S はこのケットが **Schrödinger 流の見方** *Schrödinger picture* で見られていることを指示するもので

ある．この見方によれば，このケットは（24.1）の常微分方程式にのっとって時間について変化している．この運動方程式のエルミット共役式は，Hがエルミチアンであるため

$$-i\hbar\frac{d}{dt}\langle\alpha_S(t)|=\langle\alpha_S(t)|H^\dagger=\langle\alpha_S(t)|H \qquad (24.2)$$

となる．

微分方程式（24.1）および（24.2）の解は，今の場合仮定されているようにHが時間を含まないとすれば容易に求められる；

$$|\alpha_S(t)\rangle=e^{-iHt/\hbar}|\alpha_S(0)\rangle \qquad \langle\alpha_S(t)|=\langle\alpha_S(0)|e^{iHt/\hbar} \qquad (24.3)$$

先の微分方程式が（24.3）から導かれることは，指数関数を冪級数に展開して，項別に微分して証明することができる．

演算子 $e^{-iHt/\hbar}$ は H の冪の項の無限個の和であり，それぞれの項は一つの力学変数として一つの演算子あるいは正方行列として書き表わすことができる．結局この級数全体としてもやはり一つの力学変数になっている．この特定の場合では，Hがエルミチアンであるためこの級数がユニタリーであることは容易に証明される．しかしながら，$e^{-iHt/\hbar}$ は U, V あるいは W と同じ意味での一つのユニタリー変換ではないことを思い出しておくことは本質的な点である．つまり，この演算子は一つの表示から他のもう一つの表示への変換（ヒルベルト空間における基軸の回転）を行なうものではなく，むしろそれはケット $|\alpha_S(0)\rangle$ をケット $|\alpha_S(t)\rangle$ へ変化させ，その意味ではヒルベルト空間での状態ベクトルの一般化された回転を行なうものなのである．ただし，$e^{-iHt/\hbar}$ がユニタリーである以上，このケットのノルムは変化しない，つまりこの場合一般化された回転といってもそれは純粋の回転になっている．

Schrödinger 流の見方でのある力学変数 Ω_S の行列要素の時間的変化率は，方程式（24.1）および（24.2）を利用して容易に求められる．

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\alpha_S(t)|\Omega_S|\beta_S(t)\rangle=&\left[\frac{d}{dt}\langle\alpha_S(t)|\right]\Omega_S|\beta_S(t)\rangle\\&+\left\langle\alpha_S(t)\left|\frac{\partial\Omega_S}{\partial t}\right|\beta_S(t)\right\rangle\\&+\langle\alpha_S(t)|\Omega_S\left[\frac{d}{dt}|\beta_S(t)\rangle\right]\end{aligned} \qquad (24.4)$$

$$=\left\langle \alpha_S(t) \left| \frac{\partial \Omega_S}{\partial t} \right| \beta_S(t) \right\rangle$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\langle \alpha_S(t) | (\Omega_S H - H\Omega_S) | \beta_S(t) \rangle$$

右辺の第一項は，行列要素における変化の中で，Ω_S が何らかの時間について明示された依存関係をもちうることから生じる部分であり，第二項は状態ベクトルの時間についての変化に由来する部分である．第二項に現われる演算子は**交換関係の括弧式** *commutator bracket* とよばれているものになる．それは次式で定義されている．

$$[A, B] \equiv AB - BA \tag{24.5}$$

注意すべきことは，§22 の定義によって交換関係の括弧式は両方の行列がともに正方行列で，それらの行および列の標識が同じやり方でつけられていなければ意味をもたないということである．

(24.4) の特殊な場合で興味があるのは，Ω_S が H と可換でしかも明示された形で時間を含んでいない場合である．このとき右辺は零で，Ω のすべての行列要素は時間について一定になる．このような力学変数は**運動の定数** *constant of motion* とよばれる．

24-2 Heisenberg 流の見方

(24.3) を (24.4) に代入すれば次式が得られる．

$$\frac{d}{dt}\langle \alpha_S(0) | e^{iHt/\hbar}\Omega_S e^{-iHt/\hbar} | \beta_S(0) \rangle$$

$$=\left\langle \alpha_S(0) \left| e^{iHt/\hbar}\frac{\partial \Omega_S}{\partial t} e^{-iHt/\hbar} \right| \beta_S(0) \right\rangle \tag{24.6}$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\langle \alpha_S(0) | [e^{iHt/\hbar}\Omega_S e^{-iHt/\hbar}, H] | \beta_S(0) \rangle$$

ただし，H が $e^{\pm iHt/\hbar}$ と可換であるという事実を利用してある．ここで次の関係を使って，時間に無関係な状態ベクトルと時間に依存する力学変数とを定義しておくのが便利である．

$$|\alpha_H(t)\rangle \equiv |\alpha_S(0)\rangle = e^{iHt/\hbar} |\alpha_S(t)\rangle \tag{24.7}$$

$$\Omega_H \equiv e^{iHt/\hbar}\Omega_S e^{-iHt/\hbar} \tag{24.8}$$

もしも Ω_S が H と可換でなければ，たとえ Ω_S が時間を明示された形で含まなくても

Ω_H は t を含むことになる．添字の H は **Heisenberg 流の見方** *Heisenberg picture* を示すものである．時刻 $t=0$ では，Schrödinger 流の見方でのケットおよびブラは Heisenberg 流の見方でのケットおよびブラと同一になっているが，この時刻はもちろん任意であり，都合のよいように選ばれる．もしも $t=t_0$ がこの時刻であるならば，$e^{\pm iHt/\hbar}$ は $e^{\pm iH(t-t_0)/\hbar}$ で置き換えられることになる．

$|\alpha_H(t)\rangle$ は時間に無関係なのだから，ことさら t を書き出しておくことは省略してよい．さらに，(24.6) の左辺の時間についての微係数は行列要素の中へ取り込むことができるから，結局方程式は次のような形をとることになる．

$$\left\langle \alpha_H \left| \frac{d}{dt}\Omega_H \right| \beta_H \right\rangle = \left\langle \alpha_H \left| \frac{\partial \Omega_H}{\partial t} \right| \beta_H \right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle \alpha_H | [\Omega_H, H] | \beta_H \rangle \qquad (24.9)$$

ただし (24.9) にしたがって

$$\frac{\partial \Omega_H}{\partial t} \equiv \left(\frac{\partial \Omega}{\partial t}\right)_H = e^{iHt/\hbar}\frac{\partial \Omega_S}{\partial t}e^{-iHt/\hbar}$$

と定義してある．(24.9) の方程式は任意のブラと任意のケットに対して成り立つから，演算子自身としても成り立つはずである．このようにして，Heisenberg 流の見方から見た運動方程式が導かれる．

$$\frac{d\Omega_H}{dt} = \frac{\partial \Omega_H}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\Omega_H, H] \qquad (24.10)$$

この方程式は (24.8) を微分して直接にも導かれるが，以下で示すように，これに対応する古典論の運動方程式と最も相似した方程式なのである．(24.8) に注意すれば当然のことではあるが，H は Schrödinger 流と Heisenberg 流のいずれの見方においても同一なのである．

要するに，ある物理系の時間についての変化の記述には二通りの対照的な仕方で見ることが許されることがわかる．Schrödinger 流の見方では，力学変数は（明示された形で時間を含む可能性を除く限りでは）時間について一定であり，状態ベクトルが方程式 (24.1) にしたがって変化してゆく．Heisenberg 流の見方では，状態ベクトルは時間について一定であり，力学変数が方程式 (24.10) にしたがって変化してゆく．一方の見方から他方の見方への変換は (24.7) および (24.8) にしたがってユニタリーな力学変数 $e^{\pm iHt/\hbar}$ を利用して行なわれる．

これらの時間についての変化に対する“見方”を指して“表示”とよぶことがと

きおりなされているが，以上では慎重を期してこの種のよび方を避けておいた．というのは，状態および力学変数の特定の形の基準になるヒルベルト空間の基軸の選び方，あるいはそれと同等な関数の規格完全直交系の選び方の指示に対して“表示”という言葉をとっておきたいからである．この点に関連して次のことを注意することは重要である．すなわち，(24.1)，(24.7)，(24.8) および (24.10) の方程式は容易に示されるようにすべての表示において同一の形をもつのである．一方，一つの見方から他のもう一つの見方へと見方を変えることに関連しては“変換”という言葉を用いる．その理由は，この変化が一つのユニタリー演算子を使って達成されるからである．この同じ理由によって，状態ベクトルのすべてのノルムおよび内積は，表示に無関係であると同時に，見方にも無関係であり，時間について一定になっているのである．

24-3 相互作用からの見方 (Dirac 流の見方)*)

(24.2) と (24.3) での議論が示しているように，ある物理系の時間についての発展を記述するのに，状態ベクトルだけが中心になるとも，力学変数だけが中心であるとも，そのいずれともいえないのである．この両者はユニタリー変換 $e^{-iHt/\hbar}$ を使ってその役割を入れ換えることができ，その意味で二つの見方は同等に正しいのである．両方の見方を通じて変わらない量として，$\langle\alpha|\Omega|\beta\rangle$ のような一対の状態に対して計算される力学変数の行列要素がある．固有値とか期待値さらに遷移確率といったものはこれらの行列要素から求めることができるという意味で，この種の量こそが理論の本質的な物理的内容を与えている．明らかに，任意のユニタリー変換は，それが時間を含むと含まないにかかわらず，状態および力学変数の双方に適用することが許され，しかもその結果行列要素の値が影響をうけることはない．つまり，幾らでも多数のそれぞれ異なった表示ないしは見方というものをつくることができるわけである．

中でも特に便利な第三の見方としては，ハミルトニアンを，次のように二つの部分に分割することによって指定できる見方がある．

$$H = H_0 + H' \tag{24.11}$$

ただし，H_0 は時間を直接に含んでおらず，その上にある簡単な構造をもつものとする．たとえば，H_0 が運動エネルギーであって H' がポテンシャルエネルギーであってもよ

*) p. 326 の脚注参照.

いし，あるいは H_0 がクーロン場のような比較的簡単なポテンシャルに対するハミルトニアンであって，H' がある外部からの電磁場のような何らかの附加的な相互作用になっていてもよい．後者のような場合では，H' として時間を明示的に含むことが許されている場合が興味があることが多いので，以下の話ではこの可能性を認めておくことにする．H, H_0 および H' は一般には互いに可換になっていないので，種々の見方でのこれらの量を区別するために添字を用いなければならない．

次の方程式によって**相互作用からの見方** *interaction picture* (**Dirac 流の見方** *Dirac picture*) を定義する．

$$|\alpha_I(t)\rangle \equiv e^{iH_{0S}t/\hbar}|\alpha_S(t)\rangle$$
$$\Omega_I(t) \equiv e^{iH_{0S}t/\hbar}\Omega_S e^{-iH_{0,S}t/\hbar} \tag{24.12}$$

つまり，$H'=0$ とすれば Dirac 流の相互作用からの見方と Heisenberg 流の見方とは同一である．また以前の議論からわかるように $H_{0I}=H_{0S}$ で，さらに (24.12) の後の式の示しているように $H_{0I}=H_{0S}$. しかし一般的には $H_I \neq H_S$, $H_{0H} \neq H_{0S}$ で，さらに H_S', H_H' および H_I' はすべて相異なる．(24.12) の最初の方程式を微分してやれば，$|\alpha_I(t)\rangle$ の運動方程式として次の方程式が得られる．

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}|\alpha_I(t)\rangle &= -H_{0S}e^{iH_{0S}t/\hbar}|\alpha_S(t)\rangle + i\hbar e^{iH_{0S}t/\hbar}\frac{d}{dt}|\alpha_S(t)\rangle \\ &= -H_{0S}|\alpha_I(t)\rangle + e^{iH_{0S}t/\hbar}H_S e^{-iH_{0S}t/\hbar}|\alpha_I(t)\rangle \\ &= e^{iH_{0S}t/\hbar}H'_S e^{-iH_{0S}t/\hbar}|\alpha_I(t)\rangle \\ &= H'_I|\alpha_I(t)\rangle \end{aligned} \tag{24.13}$$

ただし，(24.1)，(24.11) および (24.12) の二番目の式が利用されている．同様に，(24.12) の第二式を微分すれば，$\Omega_I(t)$ に対する次の運動方程式が得られる．

$$\frac{d\Omega_I}{dt} = \frac{\partial\Omega_I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\Omega_I, H_{0S}] = \frac{\partial\Omega_I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\Omega_I, H_{0I}] \tag{24.14}$$

Dirac 流の相互作用からの見方のねらいは，状態ベクトルと力学変数のどちらか一方を時間的に一定にさせて，他方に全ハミルトアンによって引きおこされた時間についての変化を背負わせるかわりに，時間についての変化の一部を状態ベクトルに，残りの部分を力学変数に割り当てることにある．この見方では状態ベクトルは H' にしたがって変化し，力学変数は H_0 にしたがって変化している．一方では (24.1) と (24.13) の間に相似があると同時に他方では (24.10) と (24.14) の間に相似があるという

ことに注意されたい．この見方が便利なのは，H' が小さな攪乱すなわち摂動である場合である．というのは，その場合には，力学変数は摂動のない場合の形をもち，状態変数は時間についてほとんど一定になっているからである．

24-4 エネルギー表示

エネルギー表示は固有値 E_k をもつ全ハミルトニアンの固有状態であるケット $|k\rangle$ で指定される．この場合方程式 (24.1) が示すように，Schrödinger 流の見方では時間を含むケット $|k_S(t)\rangle$ は次の方程式を満たす．

$$i\hbar\frac{d}{dt}|k_S(t)\rangle = H|k_S(t)\rangle = E_k|k_S(t)\rangle$$

この方程式を積分すると

$$|k_S(t)\rangle = |k_S(0)\rangle e^{-iE_kt/\hbar} \tag{24.15}$$

となる．これは (8.3) と一致する．方程式 (24.15) およびその共役方程式を利用すると，時間を明示的に含んでいない演算子の Schrödinger 流の見方での行列要素の時間についての変化の仕方を求めることができて，

$$\langle k_S(t)|\Omega_S|l_S(t)\rangle = \langle k_S(0)|\Omega_S|l_S(0)\rangle e^{i(E_k-E_l)t/\hbar} \tag{24.16}$$

となる．この結果は当然 Heisenberg 流の見方での行列要素 $\langle k_H|\Omega_H|l_H\rangle$ に等しいはずであるが，そのことを具体的に証明することは容易である．

方程式 (24.16) からわかるように，エネルギー表示での対角線からずれた行列要素は Bohr の振動数条件 (§2をみよ) 通りに，定常状態間のエネルギー差に比例する振動数で時間について振動している．このことはこの種の行列要素が状態間の遷移確率に関係しているという §23 の末尾での注意と一致している．時間を明示的に含んでいない演算子に対してはエネルギー表示におけるその行列の対角要素すなわち期待値が時間について一定であるということもまた (24.16) から導かれる．

24-5 古典論のラグランジアンとハミルトンの運動方程式

(24.10) の方程式とこれに対応する古典論の方程式との間の相似性を明らかにするために，古典的なハミルトンの理論の構造を簡単に説明しておく．f 個の自由度をもつ保存的な力学系の運動方程式は，座標 q_i，速度 $\dot{q}_i \equiv dq_i/dt$ および時間の関数であるラグ

ランジアン $L(q_1, \cdots, q_f, \dot{q}_1 \cdots \dot{q}_f, t)$ から次の変分原理[1]を使って導き出すことができる.

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0 \qquad \delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0 \tag{24.17}$$

その結果としてのラグランジ方程式は次のものになる.

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \qquad i = 1 \cdots f \tag{24.18}$$

ここで q_i に**正準共役な運動量** *canonically conjugate momentum* を $p_i \equiv \partial L / \partial \dot{q}_i$ として，さらに座標および運動量の関数としてのハミルトニアンを

$$H(q_1 \cdots q_f, p_1 \cdots p_f, t) = \sum_{i=1}^{f} p_i \dot{q}_i - L \tag{24.19}$$

として定義することにすれば，Hの変分から次のハミルトンの運動方程式が導かれる.

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad i = 1 \cdots f \tag{24.20}$$

座標，運動量および時間の任意の関数の時間についての変化は，位相（空間中の代表）点（$q_i(t), p_i(t), i = 1 \cdots f$）の運動経路に沿って計算され，それは（24.20）のハミルトニアンの方程式を使って次のようになる.

$$\frac{d}{dt} F(q_1 \cdots q_f, p_1 \cdots p_f, t) = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right)$$

$$= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right)$$

座標および運動量の任意関数 A, B についての **Poisson 括弧** *Poisson bracket* $\{A, B\}$ を次のものとして定義する.

$$\{A, B\} \equiv \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) \tag{24.21}$$

このポアッソン括弧を使えば，力学変数の関数Fの運動方程式は次のようになる.

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} \tag{24.22}$$

---

1) E. T. Whittaker, "Analytical Dynamics" 第3版 (Cambridge, London, 1927) の99節，109節；H. C. Corben and P. Stehle "Classical Mechanics" (Wiley, New York, 1950) の26節，63節；H. Goldstein, "Classical Mechanics" (Addison-Wesley, Reading, Mass. 1950) の第2章，第7章；A. Katz, "Classical Mechanics, Quantum Mechanics, Field Theory" (Academic, New York, 1965) の第1章.

方程式 (24.22) の左辺は位相点の運動に沿っての F の全微係数である．右辺の第一項は F が直接 t を含むことを考慮したもので，最後の項は F の関数値を与えている位相点の運動から生じるものである．

24-6　ポアッソン括弧と交換関係

方程式 (24.10) と (24.22) との間の強い相似性は次のことを示唆している．すなわち，古典的な運動方程式の量子的な対応物は，交換関係を $i\hbar$ で割ったものをポアッソン括弧と入れ換える，つまり

$$\{A, B\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[A, B] \tag{24.23}$$

として，ハイゼンベルグ流の見方で考えてゆくことにすれば一般に求められる．

この考え方の根拠を与えるものとして次の二つの事実に気がつく．第一は一組の正準変数 q_i, p_i からもう一つの組の正準変数 Q_i, P_i への接触変換に対する古典論の条件に関するものである[1]．この条件はポアッソン括弧を元の変数 q_i, p_i に関して計算するものとして，次のようになる．

$$\{Q_i, P_i\} = \delta_{ij}, \qquad \{Q_i, Q_j\} = 0, \qquad \{P_i, P_j\} = 0 \tag{24.24}$$

§6 で示したように，p_x 等に対して微分演算子 $-i\hbar(\partial/\partial x)$ 等を置き換えることによって，古典論から量子論へうまく移行させることができた．このように置き換えたときの x と p_x との間の交換関係は，それを座標のある任意関数 $g(x)$ に作用させることによって求めることができる．

$$(xp_x - p_x x)g(\mathbf{r}) = -i\hbar\, x\frac{\partial g}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(xg) = i\hbar g(\mathbf{r}) \tag{24.25}$$

$g(\mathbf{r})$ は任意であるから，この組およびその他の組の交換関係は次のような演算子方程式として書くことができる．

$$\begin{aligned} xp_x - p_x x &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right) = i\hbar \\ xp_y - p_y x &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}x\right) = 0 \\ xy - yx &= 0 \qquad p_x p_y - p_y p_x = 0 \quad \text{等} \end{aligned} \tag{24.26}$$

---

1) Whittaker 前掲書　300, 307頁；Corben and Stehle 前掲書　第11～13章；Goldstein 前掲書，第8章；Katz 前掲書．

これらは，(24.23) の置き換えをしてみると古典論の方程式 (24.24) と一致している.

第二に気がつく点は，交換関係の代数的性質はポアッソン括弧の代数的性質と同一になっているということである．そのことは (24.21) の定義から容易に証明される．すなわち

$$\{A, B\} = -\{B, A\}, \qquad \{A, c\} = 0 \qquad \text{ただし } c \text{ は一つの数}$$
$$\{(A_1 + A_2), B\} = \{A_1, B\} + \{A_2, B\}$$
$$\{A_1 A_2, B\} = \{A_1, B\} A_2 + A_1 \{A_2, B\} \tag{24.27}$$
$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0$$

非可換になる可能性のある因子の順序についても変化はない．Dirac[1] が証明しているように，ポアッソン括弧の量子論的な対応物が (24.23) の右辺になるということは，(24.27) の方程式によってきまってくるのである；もちろん，この議論に関する限りでは定数 $\hbar$ は任意である (なお問題9を見よ).

24-7 古典系の量子化

ここで対応原理の意味であるいは古典論の極限で任意の特定の古典的な系に立ちもどる量子系を求めるのに使える手続きとして納得できるものが得られる．つまり，ポアッソン括弧を使って古典論でのハミルトンの運動方程式を書いておいて，(24.23) に従ってポアッソン括弧を交換関係で置き換えてやりさえすればよい．そうすれば (24.22) の古典論の運動方程式は，力学変数のハイゼンベルク流の見方での時間についての変化の仕方を述べる量子論の方程式 (24.10) になる．同様な手続きによって，古典論の関係式 (24.24) は

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \qquad [q_i, q_j] = 0 \qquad [p_i, p_j] = 0 \tag{24.28}$$

になる[2]．これらの**量子条件** *quantum conditions* は (24.26) の一般化になっており，この節の前半で議論したいろいろな見方のどの見方においても成立することは容易にわかる．つまりハイゼンベルク流の見方でという指定は運動方程式に対して必要になるだけである；この節の残りの部分を通じて運動に対してはこの見方に立っているものと仮定することにして，添字 H を省略することにする.

---

1) Dirac，前掲書，第21節.

2) このとき (12.7) 式の導き方から分かるように，正準変数の任意の一対に対して $\Delta q_i \cdot \Delta p_j \geq \frac{1}{2}\hbar$ となることに注意.

以上の量子化の手続きを応用する際，二つの点をあらかじめ注意しておくことが必要である．第一の点は，座標および運動量は直交座標で表わされなければならないということである．第二の点は，非可換な因子の順序における任意性についてであるが，この点は通常の場合は可能な種々の順序の対称的な平均をとることによって解決される．後に述べる例ではこれらの注意点が具体的に示されている．

古典力学から量子力学へ移行を行なう一意的なやり方は存在しないということをはっきりさせておくことは重要である．古典論の極限であるいは対応原理の極限で零になるような項を量子論的な運動方程式に付け加えることはいつでも可能なのである．一方，ある系の古典論での振舞いが知られているとすれば，このことがその量子論的な方程式にある種の制限を課していることも事実である．その意味で，以上に述べた手続きは一般には正しい古典的な極限をもつ量子論的な系として最も簡単なものを与えることになる．この最も簡単な系は真実の事態の示す興味ある側面を欠くということはありうる；たとえばある種の荷電粒子が現実にもつ固有のスピンとか磁気能率といった性質は次に取り扱われている例には現われてこないのである．

24-8　電磁場内での粒子の運動

以上で説明した量子化の手続きの一例として，一般の外部電磁場内での一個の荷電質点の運動の問題を考える．古典論のハミルトニアンは，正準座標 $\mathbf{r}, \mathbf{p}$ および電磁ポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \phi(\mathbf{r}, t)$ を使って表わせば

$$H=\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+e\phi \tag{24.29}$$

である．[1] ここで e は粒子のもつ荷電で，c は光の速さである；また電場および磁場の強さはポテンシャルを使って次式で与えられる．

$$\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}-\nabla\phi, \qquad \mathbf{H}=\nabla\times\mathbf{A} \tag{24.30}$$

直交座標での (24.28) の量子条件は次のようになる．

$$[x, p_x]=[y, p_y]=[z, p_z]=i\hbar \tag{24.31}$$

---

1) J. H. Van Vleck, "The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities" (Oxford, New York, 1932) の p. 7, 20〔邦訳：小谷・神戸訳「物質の電気分極と磁性」吉岡書店)〕. 本書ではガウス単位系が用いられている．

ただし，これら以外の座標および運動量の成分同志の対は可換になる．そこでHに対する（24.29）の表式と（24.31）の関係とを（24.30）の方程式と一緒にして使って，粒子の速度 $d\mathbf{r}/dt$ および加速度 $d^2\mathbf{r}/dt^2$ の表式を計算して，それらに対応する古典論の表式と比べることにしよう．

24-9 交換関係を求めること

（24.29）を（24.10）に代入する結果として生じるいくつかの交換関係の評価を容易にするために，二，三の初等的な結果を導いておく．2個の $\mathbf{r}$ の任意関数は，$\mathbf{r}$ のすべての成分が互いに交換する以上，互いに可換である．また（24.31）の結果として，

$$x^2 p_x - p_x x^2 = x(p_x x + i\hbar) - p_x x^2 = (p_x x + i\hbar)x + i\hbar x - p_x x^2 = 2i\hbar x$$

これから帰納法によって

$$x^n p_x - p_x x^n = ni\hbar x^{n-1} \tag{24.32}$$

が容易に証明される．

（24.32）の結果として，x, y, z についての一つの羃級数として表わすことのできる任意関数 $f(\mathbf{r})$ に対し

$$[f(\mathbf{r}), p_x] = f(\mathbf{r})p_x - p_x f(\mathbf{r}) = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}f(\mathbf{r}) \tag{24.33}$$

という関係が成立することが導かれる[1]．（24.25）にあるような微分演算子としての p_x の表示を利用すれば，（24.33）の方程式がさらに羃級数よりももっと一般的な関数に対しても成り立つことを確かめることができる；つまり（24.33）の左辺を任意関数 $g(\mathbf{r})$ に作用させてみれば，

$$[f(\mathbf{r}), p_x]g(\mathbf{r}) = -i\hbar\left[f(\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}f(\mathbf{r})\right]g(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r})\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial x}f(\mathbf{r})\right]$$

得られ，これは $g(\mathbf{r})$ が任意である以上（24.33）の演算子としての等式と同等である．

（24.33）を繰り返して適用することによって，次の関係は容易に証明される．

$$f(\mathbf{r})p_x^2 - p_x^2 f(\mathbf{r}) = i\hbar\left(p_x\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial x}p_x\right) = 2i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x + \hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \tag{24.34}$$

---

1) この結果は古典論での関係 $\{f(\mathbf{r}), p_x\} = \partial f(\mathbf{r})/\partial x$ に対応している（方程式（24.23）と比較せよ）．

24-10 荷電粒子の速度と加速度

ところで (24.29) のハミルトニアンは (24.33) を利用して次のように書き直すことができる.

$$
\begin{aligned}
H &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}+\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}) + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + e\phi \\
&= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{mc}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} + \frac{ie\hbar}{2mc}\nabla\cdot\mathbf{A} + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + e\phi
\end{aligned}
\tag{24.35}
$$

そうすれば $\mathbf{r}$ の一つの成分の時間についての微係数は (24.10) から次のようになることが容易に示される.

$$
\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m}\left(p_x - \frac{e}{c}A_x\right) \tag{24.36}
$$

この結果は電磁場が存在する場合の粒子の速度と運動量との間の古典関係と一致している.

粒子の加速度の成分は

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2x}{dt^2} &= \frac{1}{m}\left(\frac{dp_x}{dt} - \frac{e}{c}\frac{dA_x}{dt}\right) \\
&= \frac{1}{i\hbar m}[p_x, H] - \frac{e}{mc}\frac{\partial A_x}{\partial t} - \frac{e}{i\hbar mc}[A_x, H]
\end{aligned}
$$

で与えられる. この右辺の計算は真正直にやりさえすればよいがやや退屈な計算になり, その結果は次のように書くことができる.

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2x}{dt^2} = &-\frac{e}{m}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{e}{2m^2c}\left[\left(p_y - \frac{e}{c}A_y\right)\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right)\right. \\
&\left. + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right)\left(p_y - \frac{e}{c}A_y\right)\right] \\
&- \frac{e}{2m^2c}\left[\left(p_z - \frac{e}{c}A_z\right)\left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\right. \\
&\left. + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\left(p_z - \frac{e}{c}A_z\right)\right]
\end{aligned}
\tag{24.37}
$$

24-11 ローレンツ力

(24.37) は, それと同様な y- および z 成分の方程式と一諸にして次のような“力”に対する単一のベクトル方程式として書き表わすことができる.

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}=e\left(-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}-\nabla\phi\right)$$
$$+\frac{1}{2}\frac{e}{c}\left[\frac{1}{m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\times(\nabla\times\mathbf{A})-(\nabla\times\mathbf{A})\times\frac{1}{m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right] \quad (24.38)$$
$$=e\mathsf{E}+\frac{1}{2}\frac{e}{c}\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt}\times\mathsf{H}-\mathsf{H}\times\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right)$$

ただし，(24.30) および (24.36) の方程式を利用してある．(24.36) の方程式は，粒子の速度 $d\mathbf{r}/dt$ を $\mathbf{v}$ と書き，$\mathbf{v}\times\mathsf{H}$ と $-\mathsf{H}\times\mathbf{v}$ の二つの項の対称的な平均をとってそれを $\mathbf{v}\times\mathsf{H}$ と書くことにすれば，これに対応する古典論での表式（すなわちローレンツ力）

$$e\mathsf{E}+\frac{e}{c}(\mathbf{v}\times\mathsf{H})$$

と一致している．$\mathbf{v}\times\mathsf{H}$ と $-\mathsf{H}\times\mathbf{v}$ という二つの項は古典論では同一になるが，量子力学では (24.36) で与えられる $\mathbf{v}$ が H と可換でないため異なってくる；さらにこれら二項の和はエルミチアンになるが，それぞれの項はエルミチアンになっていない．

(24.38) の方程式は§7 で議論したエーレンフエストの定理の一つの拡張を含んでいる．対角要素を考えることにすると，ハイゼンベルク流の見方でのケットは時間を含まないから左辺は粒子の質量とその位置ベクトルの期待値の時間についての二次微係数との積になっており，右辺は粒子の荷電に作用しているローレンツ力の期待値になっている．つまり，(24.38) の意味するところは，ある波束が十分よく局所化されていて，その波束の拡がりを通じての電磁場の変化の大きさが無視しうる程度である場合には，その波束は一つの古典的粒子のように運動するということである．この結果はまた，(24.1) および (24.35) にしたがってシュレーディンガー流の見方での波動方程式を

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}\cdot\nabla+\frac{ie\hbar}{2mc}\nabla\cdot\mathbf{A}+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2+e\phi\right)\psi \quad (24.39)$$

ととることにすれば§7 の方法によって得ることができる．

24-12 ヴィリアルの定理

量子力学におけるヴィリアル定理の証明は，古典力学における対応する証明からの類推を使って与えることができる．古典力学での証明の出発点は，もともと週期系に対しては零になっている量である $\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}$ の時間について微係数という量の時間平均をとること

である．量子力学においてこの量に類比される量は $\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}$ の期待値の時間についての微係数あるいはエネルギー表示での $\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}$ と H との交換関係の行列の対角要素になっており，これもまた零である．つまり

$$\frac{d}{dt}\langle\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle[(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}),H]\rangle=0$$

一方，

$$[(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}),H]=\left[(xp_x+yp_y+zp_z),\ \frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}+V(x,y,z)\right]$$
$$=\frac{i\hbar}{m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)-i\hbar\left(x\frac{\partial V}{\partial x}+y\frac{\partial V}{\partial y}+z\frac{\partial V}{\partial z}\right)$$
$$=2i\hbar T-i\hbar(\mathbf{r}\cdot\nabla V)$$

ただし，Tは運動エネルギーである．要するに結論としては

$$2\langle T\rangle=\langle\mathbf{r}\cdot\nabla V\rangle \tag{24.40}$$

注意したいことは，議論を $\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}$ でもって始めようと，あるいは $\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}$ でもって始めようと，結果には影響がないということである．というのは，$\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}$ と $\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}$ との間の差は一つの定数で，したがって H と可換であるからである．

もしも V が球対称で，r^n に比例しており，さらにその期待値が存在するものとすれば，(24.40) から $2\langle T\rangle=n\langle V\rangle$ であることがわかる．この結果で $n=-1$ の場合は第IV章の問題13の結果と一致しており，$n=2$ の場合は §13 の結果と一致している．

25□調和振動子の行列理論

一次元の調和振動子については §13 でシュレーディンガー方程式の立場から議論しておいた．この系はまた行列方程式を直接操作することによっても取り扱うことができるのである．ハミルトニアンは $V(x)=\frac{1}{2}Kx^2$ としたときの方程式 (23.2) の一次元での形，すなわち，

$$H=\frac{p^2}{2m}+\tfrac{1}{2}Kx^2 \tag{25.1}$$

ただし x および p は，いずれも物理的に測定可能な力学変数である以上エルミチアンである．量子条件は，

$$xp-px=i\hbar \tag{25.2}$$

である．この系のエネルギー固有値および固有関数を求めるにはこれ以上の知識を必要としないのである[1]．

25-1 エネルギー表示

まず最初はHが対角型になっているエネルギー表示を使って議論をする．そうすれば方程式（25.1）はディラックの記法を使って次のように書いてよいことになる．

$$\begin{aligned}\langle k|H|l\rangle &= E_k\langle k|l\rangle \\ &= \frac{1}{2m}\langle k|p|j\rangle\langle j|p|l\rangle+\tfrac{1}{2}K\langle k|x|j\rangle\langle j|x|l\rangle\end{aligned} \tag{25.3}$$

ここでは（23.33）のときと同様に和をとる記号 S_j は省略されている．ところでpはエルミチアンであるから

$$\langle j|p|l\rangle=\langle l|p^\dagger|j\rangle^*=\langle l|p|j\rangle^*$$

であり，xの行列要素に対しても相似の関係が成立する．したがって，（25.3）の対角要素についてみると，右辺は行列要素の絶対値の自乗の和になっており，したがって負にはならない．あるエネルギー固有値 E_k が零になりうるのは，行列要素 $\langle k|p|j\rangle$ および $\langle k|x|j\rangle$ がすべてのjに対して零になる場合だけである．ところがこのことは（25.2）のk番目の対角要素と矛盾する．したがってこの系のすべてのエネルギー固有値は正であるという結論になる．

話をもう一段すすめるために，xおよびpのHとの交換関係を計算してみると次のようになる．

$$xH-Hx=\frac{i\hbar}{m}p,\qquad pH-Hp=-i\hbar Kx \tag{25.4}$$

一般にこの種のタイプの方程式が利用価値があるのは，交換関係の中の因子の一つが対角型になっているように表示が選ばれている場合である．というのはその場合には一つの行列要素をとってみれば2個の固有値の間の差が現われるからである．たとえば今の場合（25.4）の最初の方程式は次のようになる．

$$\begin{aligned}\langle k|x|j\rangle\langle j|H|l\rangle-\langle k|H|j\rangle\langle j|x|l\rangle &= (E_l-E_k)\langle k|x|l\rangle \\ &= \frac{i\hbar}{m}\langle k|p|l\rangle\end{aligned} \tag{25.5}$$

1) Dirac（前掲書），第34節．

同様なやり方で，(25.4) の二番目の方程式は次のようになる．

$$(E_l-E_k)\langle k|p|l\rangle=-i\hbar K\langle k|x|l\rangle \tag{25.6}$$

(25.5) と (25.6) から $\langle k|x|l\rangle$ を消去すると，$\langle k|x|l\rangle=\langle k|p|l\rangle=0$ か，あるいは

$$E_l-E_k=\pm\hbar\left(\frac{K}{m}\right)^{\frac{1}{2}}=\pm\hbar\omega_c \tag{25.7}$$

かのいずれかであることが結論される．ただし，ω_c は §13 におけると同様に対応する古典的調和振動子の角振動数である．第一の可能性をかりに度外視しておいてよいとすれば，エネルギー固有値はすべて $\hbar\omega_c$ の整数倍だけ互いに異なっていることになる．この場合には，以下でなされているように，これらの固有値は n をある正の整数または零として $(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c$ に等しいことを証明することができる．もしも第一の可能性を利用して異なるエネルギー固有値をもつ状態が出てくるようにしようとすれば，この新しい状態に対しては x および p を表わす行列は恒等的に零になり，その結果はふたたび (25.2) と矛盾することがわかる．結局，可能な状態としては $\hbar\omega_c$ の整数倍だけ異なるエネルギー固有値をもつ状態に限られることになる．

25-2 上昇および下降の演算子

(25.5) と (25.6) の方程式はまたちがったやり方で結びつけることができる．(25.5) に $-im\omega_c$ をかけてそれを (25.6) に加えると，その結果は

$$(E_l-E_k-\hbar\omega_c)\langle k|(p-im\omega_c x)|l\rangle=0$$

となる．つまり $\langle k|(p-im\omega_c x)|l\rangle$ が零にならないのは $E_k=E_l-\hbar\omega_c$ が成立しているときに限られる．このことは，$p-im\omega_c x$ をケット $|l\rangle$ に作用させた結果が，$|l\rangle$ より $\hbar\omega_c$ だけ低いエネルギーをもつケット $|k\rangle$ にある数をかけたものになることを意味している．同様なやり方で，それにエルミット共役な演算子 $p+im\omega_c x$ は任意の状態のエネルギーを $\hbar\omega_c$ だけあげることが容易に示される．もしも

$$(p-im\omega_c x)|0\rangle=0 \tag{25.8}$$

を満たすような最低エネルギーの固有状態 $|0\rangle$ が存在しないとすれば，エネルギーは正でなければならない以上任意のケットにエネルギーを下げる演算子を繰り返して適用することは究極的にはある難点に導くことになる．

この最低エネルギーの固有値は (25.8) から，それに左から $p+im\omega_c x$ を作

用させて求めることができる．その結果は次の通りである．

$$\begin{aligned}(p+im\omega_c x)(p-im\omega_c x)|0\rangle &= [p^2+m^2\omega_c{}^2x^2+im\omega_c(xp-px)]|0\rangle \\ &=(p^2+m^2\omega_c{}^2x^2-m\hbar\omega_c)|0\rangle \\ &=2m(H-\tfrac{1}{2}\hbar\omega_c)|0\rangle=0\end{aligned}$$

つまり $|0\rangle$ は固有値 $\frac{1}{2}\hbar\omega_c$ をもつ H の一つの固有状態である．エネルギーを上げる演算子 $p+im\omega_c x$ を $|0\rangle$ に適用するとエネルギー $\frac{3}{2}\hbar\omega_c$ をもつケット $|1\rangle$ の倍数が生じる．$p+im\omega_c x$ をさらに繰り返し適用してゆくことによって固有状態の無限の系列がつくり出されてくる．これらの固有状態は順々にエネルギー固有値

$$E_n=(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_c, \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{25.9}$$

をもっており，それに応じてケット $|n\rangle$ と標示しておくと便利である．この結果は（13.8）と一致している．

エネルギーを上げたり下げたりする演算子を，それらにそれぞれ $-i(2m\hbar\omega_c)^{-1/2}$ および $i(2m\hbar\omega_c)^{-1/2}$ をかけて無次元の形にしておくと都合がよい場合が少なくない．このようにして得られる演算子 $a^\dagger$ および a はそれぞれ**上昇および下降の演算子** *raising and lowering operator* とよばれている．容易に示されるように

$$aa^\dagger=\frac{H}{\hbar\omega_c}+\frac{1}{2}, \qquad a^\dagger a=\frac{H}{\hbar\omega_c}-\frac{1}{2}$$

したがって a および $a^\dagger$ は交換関係

$$aa^\dagger-a^\dagger a=1 \tag{25.10}$$

を満たす．さらに $a, a^\dagger$ を使うと H を次のように書くことができる．

$$H=(a^\dagger a+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_c \tag{25.11}$$

（25.9）と（25.11）から $a^\dagger a$ の固有値は正の整数および零であることが結論される；$a^\dagger a$ がしばしば**個数の演算子** *number operator* とよばれるのはこの理由によるものである．この結果は（25.10）の交換関係の直接の帰結であり，その他の知識を何ら必要としないのである．a を（25.10）の方程式を満たす任意の演算子とするとき，$a^\dagger a$ の固有値が正の整数および零であるというこの事実は波動場の量子化に関連して利用されている（第XIV章を見よ）．その場合の a および $a^\dagger$ は，x と p を組み合わせたものとしてというよりむしろ最初から（*ab initio*）あらわれており，それぞれにその波動場によって表わされている粒子の個数を増やしたり減らしたりするという物理的意味

をもっている．したがってこれらの演算子は**生成および消滅の演算子** *creation and destruction operators* とよばれている．同じ意味合いから，個数の演算子 $a^{\dagger}a$ はその波動場のある固有状態に存在する粒子の個数を指定することになる．

25-3 a, x および p の行列

a の零にならない唯一の行列要素は $\langle n-1|a|n\rangle$ で，これを λ_n とする．同様に $a^{\dagger}$ の零にならない唯一の行列要素は $\langle n|a^{\dagger}|n-1\rangle$ で，(22.3) によってこれは λ_n^* に等しい．このとき $a^{\dagger}a$ の対角要素は，完全系 n' についての和をとる意味で

$$\langle n|a^{\dagger}a|n\rangle=\langle n|a^{\dagger}|n'\rangle\langle n'|a|n\rangle=|\lambda_n|^2$$

となる．この対角要素は n に等しいのであるから，λ_n は単位の大きさの位相因子がかかる可能性を除けば $n^{1/2}$ に等しいことになる．この位相因子は1に等しく選ぶことができる．結局，a および $a^{\dagger}$ に対する行列は次のようになる．

$$a=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 2^{\frac{1}{2}} & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 3^{\frac{1}{2}} & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & & \\ & & & & \cdot & & \\ & & & & & \cdot & \\ & & & & & & \cdot \end{bmatrix} \qquad a^{\dagger}=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & & & \\ 1 & 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 2^{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 3^{\frac{1}{2}} & 0 & & & \\ & & & & \cdot & & \\ & & & & & \cdot & \\ & & & & & & \cdot \end{bmatrix} \tag{25.12}$$

積 $a^{\dagger}a$ はこれらの行列からつくることができ，それは予想通り 0, 1, 2, … という固有値をもつ対角行列になる．

x および p による a および $a^{\dagger}$ の表式を逆に解くことは容易で，その結果は次のようになる．

$$x=\left(\frac{\hbar}{2m\omega_c}\right)^{\frac{1}{2}}(a^{\dagger}+a), \qquad p=i\left(\frac{m\hbar\omega_c}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(a^{\dagger}-a) \tag{25.13}$$

x および p に対する行列の具体的な形は (25.12) と (25.13) から容易に求められる．それぞれの行列は主対角線の両側に沿った縁に零でない行列要素をもっており，それらの行列要素の値は (13.18) と一致している．

25-4 座標表示

(25.8) の方程式を座標表示で解けば，ケット $|0\rangle$ の座標表示 $\langle x|0\rangle$ を求めることができる．つまり

$$\langle x|(p-im\omega_c x)|0\rangle=\langle x|(p-im\omega_c x)|x'\rangle\langle x'|0\rangle=0$$

ここで

$$\langle x|p|x'\rangle=-i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x')$$

および

$$\langle x|x|x'\rangle=x\delta(x-x')$$

したがって

$$\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-im\omega_c x\right)\langle x|0\rangle=0$$

この方程式は次の解をもっている．

$$\langle x|0\rangle=A_0e^{-(m\omega_c/2\hbar)x^2} \tag{25.14}$$

ただし A_0 はある任意定数である．規格化の要請

$$\langle 0|x\rangle\langle x|0\rangle\equiv\int_{-\infty}^{\infty}|\langle x|0\rangle|^2dx=1$$

から $A_0=(m\omega_c/\pi\hbar)^{1/4}=\alpha^{1/2}/\pi^{1/4}$ となることがわかる．ただし α は (13.3) のときと同様に定義されており，この結果は (13.19) と一致している．

先に注意したように，エネルギーを上げる演算子 $p+im\omega_c x$ を $\langle x|0\rangle$ に繰り返し適用することよって，すべての（規格化されていない）固有状態 $\langle x|n\rangle$ がつくり出される．容易に証明されるように，ある任意関数 $g(x)$ に対して次の関係が成立する．

$$\begin{aligned}(p+im\omega_c x)g(x)&=-i\hbar\left(\frac{d}{dx}-\frac{m\omega_c}{\hbar}x\right)g(x)\\&=-i\hbar e^{m\omega_c x^2/2\hbar}\frac{d}{dx}[e^{-m\omega_c x^2/2\hbar}g(x)]\end{aligned} \tag{25.15}$$

二回目の $p+im\omega_c x$ の適用によっては

$$(p+im\omega_c x)^2g(x)=-i\hbar e^{m\omega_c x^2/2\hbar}\frac{d}{dx}\{e^{-m\omega_c x^2/2\hbar}[(p+im\omega_c x)g(x)]\}$$

となり，(25.15) をつかって置き換えるとこれは

$$(-i\hbar)^2e^{m\omega_c x^2/2\hbar}\frac{d^2}{dx^2}[e^{-m\omega_c x^2/2\hbar}g(x)]$$

となる．これから $(p+im\omega_c x)^n g(x)$ を帰納することは自明である．つまり，$g(x)$ を（25.14）の形をもつように選ぶことにすれば次の結果が得られる．

$$\langle x|n\rangle = A_n e^{m\omega_c x^2/2\hbar} \frac{d^n}{dx^n} e^{-m\omega_c x^2/\hbar} \tag{25.16}$$

ただし A_n は規格化の定数である．（25.16）は（13.12）および（13.13）と一致している．

問　　題

1. 任意のエルミット行列は，一つのユニタリー行列によって対角化されるものと仮定し，これから二個のエルミット行列が同一のユニタリー変換によって対角化されうるための必要十分条件は，それらが可換であることを示せ。

2. 有限次数の正則行列は正方行列でなければならないことを証明せよ．なおこの場合方程式 $AA^{-1}=1$ は方程式 $A^{-1}A=1$ を含んでいることを示せ．

3. $\det(e^A)=e^{\mathrm{tr}(A)}$ を証明せよ．なおこの証明において仮定されなければならなかった A についての条件を述べよ．

4. 次の方程式を満たす二個の行列 A および B を求めよ．

$$A^2=\mathrm{O} \qquad AA^\dagger+A^\dagger A=1 \qquad B=A^\dagger A$$

ただし O は零行列で，1 は単位行列である．$B^2=B$ が成り立つことを示し，B に縮退がないと仮定して，B が対角型になっている表示での A および B の具体的な形を求めよ．また，何らかの表示でこの A を対角化することができるか？

5. 次の方程式を満たす三個の行列 A, B および C を求めよ．

$$A^2=B^2=C^2=1 \qquad AB+BA=BC+CB=CA+AC=\mathrm{O}$$

ただし，1 は単位行列，O は零行列である．A に縮退がないと仮定して A が対角型になっている表示での，これらすべての行列に対する具体的な形を求めよ．

6. 次の方程式を満たす三個の行列 A, B および C の具体的な形を求めよ．

$$A^2=B^2=C^2=1 \qquad BC-CB=iA$$

ただし，1 は単位行列．$AB+BA=AC+CA=\mathrm{O}$ であることを示せ．ただし O は零行列．A に縮退がないと仮定し，A が対角型になっている表示での三個の行列のすべての具体的な形を求めよ．

7. A および B は次数の等しい任意の正方行列で，かつ $C\equiv[B,A]$ とする．もしも $[C,A]=[C,B]=0$ であるとすれば

$$e^{A+B}=e^A e^B e^{\frac{1}{2}C}$$

であることを証明せよ．

8. 単一粒子の一次元運動に対するハミルトニアンを $H=p^2/2\mu+V(x)$ とし，さらに $V(x)$ は x についての羃級数として表わしうるものとすれば，

$$\frac{dx}{dt}=\frac{p}{\mu} \qquad \frac{dp}{dt}=-\frac{dV}{dx}$$

となることを純粋の行列算法によって証明せよ．ただし x および p は Heisenberg 流の見方での力学変数である．

9．$A(x,p)$ および $B(x,p)$ は x および p についての冪級数として表わすことができ，かつ $[x,p]=i\hbar$ とする．このとき純粋に行列算法によって次の関係を証明せよ．

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}[A,B]=\{A,B\}$$

ただし右辺は x および p が古典論の変数と見なして計算された Poisson 括弧である．

10. ハミルトニアン $H=\mathbf{p}^2/2\mu+V(\mathbf{r})$ は，固有値 E_k をもつ固有ケット $|k\rangle$ の一組をもっているとする．もしも $|l\rangle$ が離散的な固有値をもつ任意のケットであるとすれば，次の方程式が成立することを証明せよ．

$$\mathrm{S}_k\,(E_k-E_l)|\langle k|x|l\rangle|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}$$

ただし，x は $\mathbf{r}$ の一つの直交成分である．この証明の副産物として第Ⅲ章問題 9 を行列を用いて証明せよ．

11. 調和振動子に対するハミルトニアンは座標表示では次のように書くことができる．

$$\langle x|H|x'\rangle=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\delta(x-x')+\tfrac{1}{2}Kx^2\delta(x-x')$$

この H を運動量表示に変換して，(13.13) または (25.13) 式で与えられている x- 表示の波動関数に対応する p- 表示の波動関数を求めよ．

12. (25.12) および (25.13) から求められた x に対する行列は，(13.18) と一致していることを示し，さらに (25.16) の方程式は (13.12) および (13.13) と一致していることを証明せよ．

第VII章　量子力学における対称性

対称性ということは，自然界の基本的属性の一つであって，それによって研究者は物理系がそれ自体で示す特異な諸側面を研究することが可能になる．たとえば，空間は一様である，つまり空間は並進運動に対する対称性をもつという仮定から，ある閉じた孤立系の全運動量は系の運動を通じて変化しないという結論が導かれる．この系の重心運動と内部運動とを分離して調べることを可能にしているのはこの結論なのである．同様に，空間は等方的である，つまり空間は回転に対する対称性をもつという仮定は，この種の系の全角運動量が一定であることを意味する．対称的な性質と保存の法則との間のこの種の結び付きは，本書ではすでに以前から，手の込んだ形式論を展開することなしに利用してきている．たとえば，水素原子に対する Schrödinger 方程式の独立変数を 7 個から 1 個にへらした場合（§16）などはそうである．しかしながら，もっと複雑な問題を解くには，問題を体系的に取り扱っておくのが便利である．より重要なことは，その結果として得られる対称性についての統一的な見地が，物理学の構造に対するより深い洞察を与えることになるということである．

本章ではまず最初，**幾何学的対称性** *geometrical symmetries* を考察する．この種の対称性はある物理系の空間および時間についての変位，空間回転および空間反転，さらに時間の進行の向きの反転に結びついているとされているものである．次には，水素原子と等方的調和振動子のエネルギー準位にあらわれる予想外の縮退の原因になっている**力学的対称性** *dynamical symmetries* を論じる．物理学において興味ある対称性としてはその他に，たとえば分子，結晶ないしは相対性に関連した種類の注目すべきものがいくつあるが，それらは省略されている．また，ここで考えられているのは主として単一の粒子，あるいはそれと同等な意味で重心系における一対の粒子であるとはいうものの，得られた結果の多くは，対称性をすべての粒子のすべての座標に適用する限り相互に作用している 2 個以上の粒子に対しても拡張することが可能である．なお同一粒子に対しては順列についての対称性が付け加わることになるが，それについては

§40で議論するつもりである.

26□空間および時間についての変位(ずれ)

以下では終始 Schrödinger 流の見方で議論を進めてゆくことにしよう. 最初に取り上げる対称性の操作として, ケット $|\alpha\rangle$ または波動関数 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ で表わされる状態にあるある物理系の空間における変位を考える. この変位の効果は一つのベクトル $\boldsymbol{\varrho}$ になっており, その結果としてケット $|\alpha\rangle$ はケット $|\alpha'\rangle$ に変化する, あるいは波動関数 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ は波動関数 $\psi_{\alpha'}(\mathbf{r})$ に変化している. すなわち,

$$\psi_{\alpha'}(\mathbf{r}+\boldsymbol{\varrho})=\psi_\alpha(\mathbf{r}) \tag{26.1}$$

(26.1) の一例として, $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ が変数 $\mathbf{r}$ が $\mathbf{r}_0$ に等しいときに極大値をもつ一つの波束である場合について注意しておく. この場合 $\psi_{\alpha'}(\mathbf{r})$ は変数 $\mathbf{r}$ が $\mathbf{r}_0+\boldsymbol{\varrho}$ に等しいときに極大値をもつ同じ形の波束になる. つまり $\psi_{\alpha'}$ の極大値は ψ_α の極大に対して $\boldsymbol{\varrho}$ だけずらされているわけである.

たった今述べたことは, 普通**積極的な** *active* 立場とよばれている. つまりこの立場では座標系は変化をうけず状態関数がずらされている. これに対し状態関数は変化をうけないとしておくが, その指定は元の座標系に関してベクトル $-\boldsymbol{\rho}$ だけずらされた座標系で行なうものとしてこれと完全に同等な**受身の** *passive* の立場が成立する. 本書で議論されている状況に対しては, 積極的な立場の方が物理的にはより適しているように思われるので, 以下ではこの立場を一貫して用いることにする. しかしながら, (積極的にずらすというより) 相対的にどう運動するかが考えられている場合, つまり同一の物理系がお互いに相手に対して運動している数人の観測者から見られているという場合には, 受身の立場の方がより都合がよいように思われる. その意味で斉次ローレンツ変換の取り扱いでは大抵の場合受け身の立場が採用されていることは注意しておかねばならない.

26-1 ユニタリーな変位(ずれ)の演算子

§23 および §24 では2種類の変換が議論された. 第一の種類の変換とは, 一つの表示からもう一つ別の表示へのユニタリー変換で, ヒルベルト空間において状態ベクトルには

変化はなく，基軸を回転するものである．この種の変換の実例は U, V および W である．第二の種類の変換は，ヒルベルト空間において基軸は変えないで状態ベクトルの一般化された回転を生じる力学変数である．この種の変換の実例は Ω および $e^{-iHt/\hbar}$ である．ここで求めたいのは，ケット $|\alpha\rangle$ をケット $|\alpha'\rangle$ に変化させる第二の種類の変換である；ケットのノルムは変位によって影響されるはずはない以上，このずれに対応する演算子はユニタリーであることが予想されるが，この予想はこの演算子を具体的につくってみせることによって証明されることになる．この演算子を $U_r(\boldsymbol{\varrho})$ とよぶことにする．ただし添字 r は空間における一つの変位であることを示すもので，変数はベクトルとしてのずらされた間隔を示すものである．〔これと対照的なのは後で考察する $U_t(\tau)$ で，これは間隔 τ だけ時間についてずらす演算子になっている〕

要するに

$$U_r(\boldsymbol{\varrho})|\alpha\rangle=|\alpha'\rangle \quad \text{または} \quad U_r(\boldsymbol{\varrho})\psi_\alpha(\mathbf{r})=\psi_{\alpha'}(\mathbf{r}) \tag{26.2}$$

である．ただし (26.2) の第二の方程式では状態ベクトルの座標表示が使われており，(26.1) を考え合わせるとこれは次のようになる．

$$U_r(\boldsymbol{\varrho})\psi_\alpha(\mathbf{r})=\psi_\alpha(\mathbf{r}-\boldsymbol{\varrho}) \tag{26.3}$$

$\psi_\alpha(\mathbf{r}-\boldsymbol{\varrho})$ を算出するにはまず最初に x 軸がベクトル $\boldsymbol{\varrho}$ の方向になるように座標軸を選んでみるのが便利である．この場合にはテイラー級数に展開した結果として

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}-\boldsymbol{\varrho})=\psi_\alpha(x-\rho, y, z)=\psi_\alpha(x, y, z)-\rho\frac{\partial}{\partial x}\psi_\alpha(x, y, z)+\frac{\rho^2}{2!}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_\alpha(x, y, z)-\cdots\cdots$$

となる．この右辺は

$$e^{-\rho(\partial/\partial x)}\psi_\alpha(x, y, z)$$

という形にまとめて書くことができる．座標軸の選び方を一般的にした場合には，$\rho(\partial/\partial x)$ は $\boldsymbol{\varrho}\cdot\nabla$ で置き換えられるべきであり，その結果次式が得られる．

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}-\boldsymbol{\varrho})=\exp(-\boldsymbol{\varrho}\cdot\nabla)\psi_\alpha(\mathbf{r})=\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\varrho}\cdot\mathbf{p}}{\hbar}\right)\psi_\alpha(\mathbf{r})$$

ここで $\mathbf{p}=-i\hbar\nabla$ として運動量の演算子が導入されている．結局，

$$U_r(\boldsymbol{\varrho})=\exp\frac{-i\boldsymbol{\varrho}\cdot\mathbf{p}}{\hbar} \tag{26.4}$$

と選べば (26.3) の方程式はすべての状態ベクトルに対して成立する．さらに，座標表

示においてのみ定義されている演算子 ∇ が $i\mathbf{p}/\hbar$ で置き換えられたため，（26.4）の方程式はすべての表示において成立することになる．$\boldsymbol{\varrho}$ が実数で $\mathbf{p}$ がエルミチアンである以上，$U_r(\boldsymbol{\varrho})$ がユニタリーであることは容易に証明される．

26-2 運動方程式

ある特定の時刻 t において任意のケット $|\alpha(t)\rangle$ によって表わされている状態にある物理系を，空間中でベクトル $\boldsymbol{\varrho}$ だけずらすことは，（26.2）および（26.4）の方程式を使えばいつでも可能になる[1]．しかしながら，異なった時刻においてこのやり方で得られたケット $|\alpha'(t)\rangle$ がこの系の可能な運動を表わすことになるということは必ずしも正しいとは限らない．言いかえれば，$|\alpha(t)\rangle$ が（24.1）の Schrödinger 流の運動方程式に従っているとしても，$|\alpha'(t)\rangle=U_r(\boldsymbol{\varrho})|\alpha(t)\rangle$ もやはり同じ方程式に従っているということは成り立つ場合もあればそうでない場合もありうるのである．このことが成り立つかどうかをしらべるために，$|\alpha'(t)\rangle$ の時間についての微係数を計算すると，

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\alpha'(t)\rangle=i\hbar U_r(\boldsymbol{\varrho})\frac{d}{dt}|\alpha(t)\rangle=U_r(\boldsymbol{\varrho})H|\alpha(t)\rangle$$
$$=U_r(\boldsymbol{\varrho})HU_r^\dagger(\boldsymbol{\varrho})|\alpha'(t)\rangle$$

となる．これが（24.1）と一致するのは，

$$U_r(\boldsymbol{\varrho})HU_r^\dagger(\boldsymbol{\varrho})=H \quad \text{すなわち} \quad [U_r(\boldsymbol{\varrho}),H]=0 \tag{26.5}$$

となる場合であり，かつその場合に限られている．もしも $\boldsymbol{\varrho}$ が任意のベクトルであることを許されているとすれば，$\mathbf{p}$ が H と可換である場合にのみ（26.5）が成り立つ．なお §24 の議論からの結論としてこの場合 $\mathbf{p}$ と H とは同時に対角化することができる．つまり，ある単一の状態が運動量とエネルギーの両方に対してはっきり定義された固有値をもつことができるわけである．

要するに以上の議論で示されたことは，ある物理系を空間内でずらすことができ，その結果もやはりその物理系として可能なものの一つになっているというとき，その物理系をエネルギーならびに運動量のはっきり定義された，時間的にかわらない値によって特徴づけることができるということである．この種の系は空間的な変位についての**対称性** *symmetry* あるいは空間的な変位についての**不変性** *invariance* をもつと言

---

1) Schrödinger 流の見方を指定している添字 S はこの場合省略されているが，それはこの見方だけが本章を通じて採用されることになっているからである．

われている．ある粒子の運動量が時間的に一定であるという場合はその粒子に力が作用していない場合であり，この場合に限ってある粒子が空間的な変位について対称または不変でありうるというのであるから，以上の結果は筋が通っている．自由電子はこの対称性をもっているが，他方水素原子内の電子はこの対称性をもたない．後者の場合波動関数をずらすことは単に瞬間的にその形を保つ一つの波束を与えることになる．

26-3　対称性と縮退

対称性の示す重要な側面の一つとして，エネルギー固有値の縮退に対する対称性の関係を問題にしなければならないことになる．あるケット $|\alpha\rangle$ がある系の一つのエネルギー固有状態を表わしているとする．つまり $H|\alpha\rangle=E_\alpha|\alpha\rangle$ さらに H と可換な何らかの演算子 Ω が存在するとする．このとき $\Omega|\alpha\rangle$ もまた同じエネルギー固有値 E_α をもつ Hの一つの固有状態であることは容易に示される．したがって，もしも $\Omega|\alpha\rangle$ が $|\alpha\rangle$ に対し一次独立であれば，このエネルギー固有値は縮退していることになる．空間的にずらされた状態は一般には元の状態に対して一次独立になっているから，($\Omega=\mathbf{p}$ の場合である）空間的な変位についての対称性は運動量固有関数によるエネルギーについての縮退を与えることになる．このことは新しい結果ではない．というのはある自由粒子のエネルギーはその運動量の大きさだけできまり，その方向にはよらないことはわかっていることだからである．ただし元の状態が空間について定数になっている場合には，このときの空間的にずらされた状態は元の状態に対して一次独立にならないため，例外的な事情が生じる．このような状態は零の運動量をもっており，非縮退の状態になる．

空間的な変位のようなある幾何学的な対称性に結びついたエネルギーの縮退をこれと見当つけることは普通容易にできる．幾何学的というよりもむしろ力学的というべき対称性ではこの点について幾何学的対称性の場合ほど始めから明らかではないが，§30ではこの種の対称性の二つの例を考察することにする．力学的対称性もやはり縮退の存在と結びついているが，むしろこの場合には上の $\mathbf{p}$ に相当する，ハミルトニアンと可換で，したがってその対称性を定義する演算子 Ω を発見することが問題になる．

26-4　ずらされた状態に対する行列要素

ある力学変数 Ω の行列要素を任意の一対の状態に対して計算しておいて，これらの状態がずらされたときの同じ演算子（力学変数）の行列要素と比較してみることができ

る．最初の行列要素を $\langle\alpha|\Omega|\beta\rangle$ ともすれば，ずらされた後の行列要素は

$$\langle\alpha'|\Omega|\beta'\rangle=\langle\alpha|U_r{}^{\dagger}(\boldsymbol{\varrho})\Omega U_r(\boldsymbol{\varrho})|\beta\rangle$$

となる．明らかに運動量の任意関数の行列要素は状態がずらされても変わらない．他方 Ω が座標の演算子 $\mathbf{r}$ である場合には，

$$U_r{}^{\dagger}(\boldsymbol{\varrho})\mathbf{r}U_r(\boldsymbol{\varrho})=\mathbf{r}+\boldsymbol{\varrho} \tag{26.6}$$

となることが証明できる．つまりずらされた状態に対する $\mathbf{r}$ の行列要素は元の状態に対する $\mathbf{r}+\boldsymbol{\varrho}$ の対応する行列要素に等しいというわけであるが，このことは予想通りの結果である．

26-5 群の概念

対称性の全面的な取り扱いに適合している数学の分野は群に関する理論である．群論の形式的な面は本書では本質的には無用であるはずであるとはいうものの，群論の考え方や用語法のあるものを参照することが都合のよい場合がしばしばある．その意味でここで，二，三の基礎的な定義をあげておくことにする[1]．

対象 a, b, c……の一つの集合があって，対象の中の任意の2つ，たとえば a および b を組み合わせて一つの対象 ab を形成することができ，その上に次にあげる条件が満たされている場合，この集合は群 *group* をつくっている．

1. ab というような組み合わせのあらゆる結果はやはりその集合のメンバーである．
2. a をこの集合の任意のメンバーとするとき，この集合は $ae=ea=a$ という性質をもつ恒等あるいは単位のメンバー e をもつ．
3. それぞれのメンバー a は $a^{-1}a=aa^{-1}=e$ であるような逆のメンバー a^{-1} をやはり

1) 対称性と群論に関するより全面的な議論に対しては次の書物を見られたい．E. P. Wigner, "Group Theory" (Academic, New York, 1959) [邦訳：森田訳「群論と量子力学」(吉岡書店，1970)] 特に15，20および26の各章；M. Hamermesh, "Group Theory and Its Applications to Physical Problems" (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1962), 特に第8章；A. Messiah, "Quantum Mechanics" (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1962) vol. II, 第XV章と附録 D; M. Tinkham, "Group Theory and Quantum Mechanics" (McGraw-Hill, New York, 1964), 特に第5章 M. L. Goldberger and K. W. Watson, "Collision Theory" (Wiley, New York, 1964) の第2章；P. Roman, "Advanced Quantum Theory" (Addison-Wesley, Reading, Mass, 1965) の第5章と附録2；H. J. Lipkin "Lie Group for Pedestrians" (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1965)；R. Hermann, "Lie Groups for Physicists" (Benjamin, New York, 1966)；A. Katz, "Classical Mechanics, Quantum Mechanics, Field Theory" (Academic, New York, 1965) の第2章．

その集合の中にもつ.

4.　集合のメンバー間の組み合わせは $(ab)c=a(bc)$ という意味で結合則を満たす.

群のメンバーは**元** *element* とよばれ，メンバーを組み合わせる操作は，たとえそれが算術的なかけ算ないしは行列のかけ算とは必ずしも関係づけられない場合にも**乗法** *multiplication* とよばれることが多い. たとえば，整数 0，±1，±2，……は組み合わせの操作を普通の算術的な加法とすれば一つの群をつくっている. この場合恒等元あるいは単位元 e は数 0 である.

ある群が**アーベリアン** *abelian* であるというのは，乗法が可換である場合つまりあらゆる一対の元に対して $ab=ba$ である場合である. ある群が**連続** *continuous* であるというのは，その元を 1 個あるいはそれ以上の連続的に変化するパラメーターによって標示することができる場合である. もしもこの群のパラメーターの連続的な変化によって任意の元から他の任意の元が導かれるならば，この群は**連続的に連結** *continuously connected* である. ある連続群が**コンパクト** *compact* であるというのは，その群の元の無限列がいずれも再びその群の中にある元を極限にもつ場合である. 二つの群の元の間に一意的な一対一対応が存在して，対応する元の積もやはりたがいに対応している場合，これらの二つの群は**同形** *isomorph* であるという. ある群が行列をその元とする他のもう一つの群と同型である場合，後者の群は前者の一つの**行列表示** *matrix representation* であるといわれる.

すべての変位のベクトル $\boldsymbol{\varrho}$ はベクトルの加法をその乗法とする一つの群をつくるが，この群はアーベリアンで連続的連結で 3 パラメーターの非コンパクト群であることは容易に確かめられる. また演算子 $U_T(\boldsymbol{\varrho})$ はずれのベクトルの群に同型な一つの群をつくる. この場合の乗法の操作は逐次的な演算になっており，この演算子の行列表現の場合には行列のかけ算になる.

26-6　時間についての変位（ずれ）

次にケット $|\alpha(t)\rangle$ によって表わされる状態を時間について間隔 τ だけずらすことを考える. その結果ケット $|\alpha(t)\rangle$ はケット $|\alpha'(t)\rangle$ に変化するとする. (26.1) との類比からこのことは

$$|\alpha'(t+\tau)\rangle=|\alpha(t)\rangle \qquad (26.7)$$

を意味している．(26.2) の最初の方程式の場合と同様に，ケット $|\alpha(t)\rangle$ のケット $|\alpha'(t)\rangle$ への一般化された回転をつくり出す演算子 $U_t(\tau)$ を定義する．すなわち

$$U_t(\tau)|\alpha(t)\rangle=|\alpha'(t)\rangle \tag{26.8}$$

(26.7) と (26.8) を組み合わせると

$$U_t(\tau)|\alpha(t)\rangle=|\alpha(t-\tau)\rangle \tag{26.9}$$

となる．(26.3) からの類推によってわかるように，(26.9) の右辺は結局次の形に書き直すことができる．

$$|\alpha(t-\tau)\rangle=e^{-\tau d/dt}|\alpha(t)\rangle \tag{26.10}$$

ここでのケットはシュレーディンガー流の見方で見られているのだから，方程式 (24.1) を使って $(d/dt)|\alpha(t)\rangle$ を $(i\hbar)^{-1}H|\alpha(t)\rangle$ で置き換えることができる．しかし，$(d^2/dt^2)|\alpha(t)\rangle$ を$(i\hbar)^{-2}H^2|\alpha(t)\rangle$で置き換えることができるのは H が時間を含まない場合に限られており，同様な注意は (26.10) にあらわれる時間についての高階の微係数にも適用される．§24 におけると同様に，H が時間的に一定であると仮定して $U_t(\tau)$ を求めると

$$U_t(\tau)=e^{i\tau H/\hbar} \tag{26.11}$$

となる．

(26.11) は，それをある物理的状態を表わす任意のケットすなわち Schrödinger 方程式 (24.1) を満たす任意のケットに適用してみれば時間的な変位の演算子に対する正しい表式になっている．$U_t(\tau)$ はHと可換であるから，(26.8) によって与えられる時間的にずらされたケット$|\alpha'(t)\rangle$ もやはり Schrödinger 方程式にしたがうことは容易にわかる．要するに，ハミルトニアンすなわちエネルギー演算子が一つの定数であるという仮定から，ある物理系を時間についてずらすことができ，その結果もやはり一つの物理系であるという結論が導かれるわけである．このような系は時間的な変位についての対称性あるいは不変性をもつといわれる．

直観的には自明のことではあるが，もしもHが時間を含んでいるならばその系は時間的なずれに対しての対称性をもたないということを示すのはいささか厄介になる．この場合にはに $U_t(\tau)$ 対する表式は (26.11) よりも幾分複雑になる．しかしながら，τ を無限に小さいとして τ について 1 次のオーダーの項だけを残す場合を考えておけば十分である．このときの $U_t(\tau)$ は近似的に $1+i\tau H(t)/\hbar$ によって与えられ，これは

明らかにτと同時に t によって変化する．この場合に $|\alpha'(t)\rangle$ がシュレーディンガー方程式を満たしているかどうかを調べるために，（26.8）の方程式から $|\alpha'(t)\rangle$ の時間についての微係数を計算してみると

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\alpha'(t)\rangle \approx -\tau\frac{dH}{dt}|\alpha(t)\rangle + U_t(\tau)H(t)|\alpha(t)\rangle$$

となる．τについて1次のオーダーまでては右辺は

$$-\tau\frac{dH}{dt}|\alpha'(t)\rangle + H(t)|\alpha'(t)\rangle$$

に等しいことになって，結局 $|\alpha'(t)\rangle$ はシュレーディンガー方程式にしたがわないことになる．言いかえれば，もしもハミルトニアンが時間と共に変化するならば，時間的にずらされた系は変化した状況中に投ぜられているわけで，したがって系は時間について正しく発展していることにはならないのである．

H が定数になっている場合には，一見（24.3）の最初の方程式

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\alpha(0)\rangle$$

と，（26.11）を使って書き直した（26.8）の方程式

$$|\alpha'(t)\rangle = e^{i\tau H/\hbar}|\alpha(t)\rangle$$

との間に矛盾があるように思われる恐れがある．これらが実際には一致していることを示すには第一の方程式では $t=-\tau$ と置き，第二の方程式では $t=0$ と置いてみて調べることにすればよい．つまりその場合両方はそれぞれ

$$|\alpha(-\tau)\rangle = e^{i\tau H/\hbar}|\alpha(0)\rangle \quad \text{および} \quad |\alpha'(0)\rangle = e^{i\tau H/\hbar}|\alpha(0)\rangle$$

となる．$t=-\tau$ とした（26.7）の方程式はこれら両式の右辺が等しいことを示している．このことを言葉で表わすことにすれば，$|\alpha'(t)\rangle$ は $|\alpha(t)\rangle$ が $t=0$ でもつ構造を $t=\tau$ でもっているといってよい．したがって $|\alpha'(t)\rangle$ は，$|\alpha(t)\rangle$ を（24.3）にしたがってτから0へ時間について逆方向に発展させることによって $|\alpha(t)\rangle$ から求めることができるのである．

27□回転，角運動量およびユニタリー群

次の対称性の演算として，ケット $|\alpha\rangle$ または波動関数 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ によって表わされる一つ

の状態にある物理系の空間内での回転を考える．回転は任意のベクトル $\mathbf{r}$ をベクトル $R\mathbf{r}$ へ回転するものとして定義される一つの線型演算子 R によって記述される．この回転はケット $|\alpha\rangle$ をケット $|\alpha'\rangle$ に，あるいは波動関数 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ を波動関数 $\psi_{\alpha'}(\mathbf{r})$ に変化させる．(26.1) との類比で，このことは

$$\psi_{\alpha'}(R\mathbf{r})=\psi_\alpha(\mathbf{r}) \tag{27.1}$$

を意味している．

27-1 固有回転群

それぞれの回転の演算子の便利な表わし方としては3×3（3行3列の）行列によってそれを表わすことができる．任意のベクトル $\mathbf{r}$ および回転させられたベクトル $\mathbf{r}_R$ の直交成分を列行列として書くことにすると，方程式 $\mathbf{r}_R=R\mathbf{r}$ は次のような行列方程式として書かれることになる．

$$\begin{bmatrix} x_R \\ y_R \\ z_R \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} R_{xx} & R_{xy} & R_{xz} \\ R_{yx} & R_{yy} & R_{yz} \\ R_{zx} & R_{zy} & R_{zz} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \tag{27.2}$$

$\mathbf{r}$ の成分が実数であるとき $\mathbf{r}_R$ の成分が実数であるべきだとする要求は行列 R の行列要素が実数であることを意味する．さらに任意の二つのベクトルのスカラー積が両方のベクトルが同一の回転をうけたときに不変であるという要求を使えば，R が規格直交であることを示すことができる：すなわち，R の三つの行は互いに規格直交になっており R の三つの列も互いに規格直交になっており，さらに R の行列式は ±1 に等しい．この節では行列式が $+1$ に等しい**本義の回転** *proper rotation* だけを考えることにしよう．行列式が零でないのだから，逆変換 R^{-1} が存在し，それは $\mathbf{r}=R^{-1}\mathbf{r}_R$ という性質をもっている．またこの R^{-1} は R の転移行列になっていることも証明することができる：すなわち $i,j=x,y,z$ として $(R^{-1})_{ij}=R_{ji}$．最後に9個の行列要素 R_{ij} について6個の独立な条件が存在するから，あらゆる回転は3個の連続的に変化するパラメーターによって記述されうることになる．

行列 R は群についての要求のすべてを満たしている．組み合わせの操作は行列の乗法で，これは結合則を満たしている．以上にあげた性質をもつ2個の行列の乗法によって同一の性質をもつ第三の行列が導かれる．行列 δ_{ij} が恒等元になっており，それぞれの R は一つの逆をもっている．回転が一般には可換ではないことを示す具体例は容易

に考え出すことができ，したがってこの群はアーベリアンでない．要するに行列Rは連続的に連結である 3-パラメーター群をつくっており，それがコンパクトであることもまた容易に示される．その行列式が$+1$に等しい，すべての3×3（3行3列）の規格直交実行列の集合であるこの群は，3次元の**直交群** *orthogonal group* $O(3)$ と名付けられている．

連続的に連結な群で，2個の元の積のパラメーターが元のパラメーターの連続かつ微分可能な関数になっているものは**リー群** *Lie group* とよばれている．空間および時間についての変位の群はコンパクトでないリー群であり，回転の群はコンパクトなリー群である．ローレンツ群は回転を記述する3個のパラメーター以外に速度変化を記述するさらにもう3個のパラメーターをもっている．つまりローレンツ群は 6-パラメーターのリー群である．ただしそれは，任意の方向での速度変化の極限値cに対応する変換が存在しないためにコンパクトではない．

27-2 幾何学的同形

それぞれの行列Rは一つの物理的な回転に対応している．したがってそれをその周りに回転が起こっている軸をその方向とし，ラジアンで測った回転角をその大きさとする一つのベクトル $\boldsymbol{\phi}$ によって表わすことができる（ただし常に回転は，原点から $\boldsymbol{\phi}$ の方向に見通したときに時計周りの方向になっているものと仮定する）． あらゆる可能な回転を表わすベクトルの終点は半径πの一つの球内を満たすことになる；ただしこの球の表面上で一つの直径の反対側の両端になる点は同じ回転を表わしている．球の内部にある二個のベクトルの終点を組み合わせて第三の球内の点をつくる手つづきは，それを最初の二点の座標を使って記述しようとすると厄介であるが，これらの三点を2個のR行列およびその積行列に一対一対応をつけてやることによってそれを決定することができる．つまり，このような半径πの球内の各点は回転群に対し同型である一つの群をつくっている[1]．しかしながら群空間に対する重みの関数が一定ではないため，このような同型群の効用は計算上のものというより多く図示的なものなのである．

この幾何学的同型は回転群が連続的に連結ではあるが，**単連結** *simply connected* ではないことを証明するのに利用することができる．単連結でないということは，群の

1) Wigner,（前掲書）90頁および249頁．〔邦訳書，105頁および299頁〕

パラメーターを任意の元から出発して他の任意の元に達する一本以上の連続的な経路に沿って変化させうるとして，これらの経路がお互いに連続的な変形によって一致させられないということを意味する．今の場合では，二種類の区別される経路が存在する．それらの中の一つは全く球の内部で元 R_1 から出発して元 R_2 に達する経路である．もう一方の種類のものは R_1 から一旦球の表面に達し，直径上の正反対の点で再び球内に現われてから R_2 に達しているものである．さらに直径上の正反対の点の間で2回飛躍をする経路は第一の種類の経路に帰着させることができ，以下同様になる．要するに回転群は**二重連結** *doubly connected* なのである．

27-3 無限小回転

恒等元に無限小の程度に近い元を調べることからリー群の構造について多くのことを学ぶことができる．予想されるところであるが，このことは全体の群を調べることに比べてはるかに簡単なのである．もしもベクトル $\boldsymbol{\phi}$ を無限小の長さのものとし，かつ $\boldsymbol{\phi}$ について一次のオーダーの量だけを残すことにすれば，$\mathbf{r}_R=R\mathbf{r}$ という関係は次のように書くことができる．

$$\mathbf{r}_R \approx \mathbf{r}+\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r} \tag{27.3}$$

(27.2) と (27.3) を組み合わせれば次のことがわかる．

$$R \approx \begin{bmatrix} 1 & -\phi_z & \phi_y \\ \phi_z & 1 & -\phi_x \\ -\phi_y & \phi_x & 1 \end{bmatrix} \tag{27.4}$$

ここで求めたいのはケット $|\alpha\rangle$ をケット $|\alpha'\rangle$ に変える，あるいは波動関数 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ を波動関数 $\psi_{\alpha'}(\mathbf{r})$ に変える変換 $U_R(\boldsymbol{\phi})$ である．つまり

$$U_R(\boldsymbol{\phi})\psi_\alpha(\mathbf{r})=\psi_{\alpha'}(\mathbf{r}) \tag{27.5}$$

(27.1) と (27.5) とを組み合わせて (26.4) を導いたのと大体同じ手順をふめば

$$\begin{aligned} U_R(\boldsymbol{\phi})\psi_\alpha(\mathbf{r}) &= \psi_\alpha(R^{-1}\mathbf{r}) \\ &\approx \psi_\alpha(\mathbf{r}-\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r}) \\ &\approx \psi_\alpha(\mathbf{r})-(\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})\cdot\nabla\psi_\alpha(\mathbf{r}) \\ &= \psi_\alpha(\mathbf{r})-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}\psi_\alpha(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

となり，結局次のように置いてよいことになる．

$$U_R(\boldsymbol{\phi}) \approx 1-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{L} \tag{27.6}$$

ただし（14.19）によって

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p} \tag{27.7}$$

はその粒子の原点の周りでの角運動量に対する演算子である．

3個の演算子 L_x, L_y, L_z は方程式（27.6）の意味でそれぞれ三つの座標軸の周りでの角度 ϕ_x, ϕ_y, ϕ_z の無限小回転の**生成元（生成演算子）** *generator* とよばれる．同様なやり方で（26.4）および（26.11）の無限小形式からは $\mathbf{p}$ および $-H$ がそれぞれ空間および時間についての無限小変位の生成元になっていることがわかる．$\mathbf{p}$ の各成分がお互いに可換であるという事実から空間についての変位の群はアーベリアンであるという結論が直接導かれる．他方，$\mathbf{L}$ の各成分はお互いに交換しない，したがって回転の群はアーベリアンではないわけである．

回転されたケット $|\alpha'\rangle$ に対する運動方程式は（26.5）の前にある議論と全く同じ手順をふんで求めることができる．考えている系が回転の対称性あるいは不変性をもっているための条件は $U_R(\boldsymbol{\phi})$ がすべての $\boldsymbol{\phi}$ に対して H と可換であること，いいかえれば生成元 L_x, L_y, L_z が H と可換であることである．この最後の条件は角運動量 $\mathbf{L}$ が一つの運動の定数になっていることを意味するが，このことは回転対称性をもつ系に対しては当然期待されるところである．また同時にそれは，もしも $\mathbf{L}|\alpha\rangle$ が $|\alpha\rangle$ に対して一次独立であればエネルギーの縮退が存在することを意味している．

27-4 ベクトル粒子のスピン

これまでに考えられた簡単な情況では無限小の対称性の変換の生成元がそれと認められているいくつかの力学変数に等しくなっているという事実は，もっと複雑な情況のもとでの力学変数自身を定義するのにこの種の演算子が利用されそうだということを示唆している．一例として，固有の**スピン角運動量** *spin angular momentum* に関連させることができる内部自由度をもっている一個の粒子を考えよう．この粒子はこれまで考えられてきたようなスカラー波動関数 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ によってではなくて，ベクトル波動関数 $\boldsymbol{\psi}_\alpha(\mathbf{r})$ によって記述されるものと仮定する．それだけでなく，状態が回転されるとき $\mathbf{r}$ が $R\mathbf{r}$ に変わるだけでなく $\boldsymbol{\psi}_\alpha$ も $R\boldsymbol{\psi}_\alpha$ に変化するものと仮定する．つまり（27.1）の方程式は，

$$\psi_{\alpha'}(R\mathbf{r})=R\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \tag{27.8}$$

となる．同じようにして，(27.5) は

$$U_R(\boldsymbol{\phi})\psi_{\alpha}(\mathbf{r})=\psi_{\alpha'}(\mathbf{r}) \tag{27.9}$$

となる．ただしこの場合の $U_R(\boldsymbol{\phi})$ は ψ_{α} のベクトルとしての性格を変えている以上テンソル演算子になっている．(27.8) と (27.9) を組み合わせると $\boldsymbol{\phi}$ についての一次のオーダーで次式が与えられる．

$$\begin{aligned}U_R(\boldsymbol{\phi})\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) &= R\psi_{\alpha}(R^{-1}\mathbf{r})\\ &\approx \psi_{\alpha}(R^{-1}\mathbf{r})+\boldsymbol{\phi}\times\psi_{\alpha}(R^{-1}\mathbf{r})\\ &\approx \psi_{\alpha}(\mathbf{r}-\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})+\boldsymbol{\phi}\times\psi_{\alpha}(\mathbf{r})\\ &\approx \psi_{\alpha}(\mathbf{r})-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{L})\psi_{\alpha}(\mathbf{r})+\boldsymbol{\phi}\times\psi_{\alpha}(\mathbf{r})\end{aligned} \tag{27.10}$$

$U_R(\boldsymbol{\phi})$ のテンソルとしての性格をはっきりあらわすのには，(27.2) と似たやり方でベクトル ψ_{α} にかけてベクトル $\psi_{\alpha'}$ をつくり出す 3×3 行列としてそれを書いておくのが一番都合がよい．その場合，(27.10) の右辺の最初の二項は単位行列に比例している．(27.3) と (27.4) との比較からわかるように，第三項は次の形に書くことができる．

$$\boldsymbol{\phi}\times\psi_{\alpha}(\mathbf{r})=-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{S})\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$$

ただし $\mathbf{S}$ の成分は次のような 3×3 行列になっている．

$$S_x=i\hbar\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{bmatrix}\qquad S_y=i\hbar\begin{bmatrix}0&0&1\\0&0&0\\-1&0&0\end{bmatrix}$$

$$S_z=i\hbar\begin{bmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{bmatrix} \tag{27.11}$$

この $\mathbf{S}$ の定義を使うと無限小回転の変換は次のようになる．

$$U_R(\boldsymbol{\phi})\approx 1-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\phi}\cdot(\mathbf{L}+\mathbf{S})$$

この無限小回転の生成元は次のベクトルの三つの成分になっている．

$$\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S} \tag{27.13}$$

このベクトルをその粒子の全角運動量であるとする．粒子の軌道角運動量の演算子は $\mathbf{L}$ で，それは $\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$ の成分には影響を与えることなくそれに含まれている $\mathbf{r}$ にのみ作用

する．演算子Sは**スピン角運動量** ***spin angular momentum*** とよばれており，$\psi_\alpha(\mathbf{r})$ の $\mathbf{r}$ による変化には影響を与えることなくその成分を入れ換える．したがって $\mathbf{L}$ と $\mathbf{S}$ はお互いに可換である．$\mathbf{L}$ と $\mathbf{S}$ とが別々では H と交換しないが，$\mathbf{J}$ としては H と可換であるということがしばしばおこる．物理的にはこのことはハミルトニアンがスピンと軌道の角運動量の相互を結びつける項を含んでいるが，両者を全体としてはまわりの情況と結合する項を含んでいないことを意味している．

(14.22) で証明したように，$L^2=L_x{}^2+L_y{}^2+L_z{}^2$ の固有値は $l(l+1)\hbar^2$ である．ただし，l は正の整数または零で**軌道角運動量の量子数** ***orbital angular momentum quantum number*** とよばれている．(27.11) の行列を直接代入してみればわかるように，$\mathbf{S}^2=S_x{}^2+S_y{}^2+S_z{}^2$ は単位行列の $2\hbar^2$ に等しくなる．この結果は軌道角運動量の場合での $l=1$ に対応している．その意味でこの粒子はスピン角運動量 $\hbar$ を具えているわけである．この結論はこの粒子を記述する波動関数 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ について仮定されたベクトルとしての変換性から導き出されたものである．波動関数の異なった変換として現われてくる他の内部自由度は，後に示されているようにスピンの異なった値を導くことになる．

27-5　生成元に対する交換関係

前に注意しておいたように，$\mathbf{L}$ の成分はお互いに可換でなく，したがって回転群はアーベリアンでない．より一般的には次のことを証明することができる．すなわち，あるリー群の無限小元の生成元の間の交換関係は，その群全体の主要な性格を決定する．というのは，恒等元から有限の距離までその群の元を積分してゆくやり方をこの種の交換関係が実質的に規定しているからである[1]．

$\mathbf{L}$ の成分間の交換関係は (27.7) と量子条件 (24.26) とから容易に求められ，その結果は次のようになる．

$$[L_x, L_y]=i\hbar L_z \qquad [L_y, L_z]=i\hbar L_x \qquad [L_z, L_x]=i\hbar L_y \tag{27.14}$$

(27.11) を直接代入してみればわかるように，$\mathbf{S}$ の各成分も同じ関係を満たしている．$\mathbf{L}$ と $\mathbf{S}$ はお互いに可換であるから，結局 $\mathbf{J}$ の各成分もやはり (27.14) の方程式を満たすことになる．これらの3個の方程式は次のような同等な形に書かれることが多い．

---

1)　Wigner，(前掲書)

$$\mathbf{J}\times\mathbf{J}=i\hbar\mathbf{J} \tag{27.15}$$

(27.15) の関係はこれまでのところスピン 0（スカラー）粒子およびスピン 1（ベクトル）粒子の全角運動量に対してのみ確かめられているものである．それにもかかわらずこれらの関係を角運動量に対する定義式として，さらに一般の場合における回転群の生成元に対する定義式として採用することにする．あるリー群の生成元はある**リー代数** *Lie algebra* の基底をつくる；この代数は任意の一対の生成元間の交換関係が生成元の一次結合になっているという意味で**閉じて** *closed* いる．ところで次になすべきことは J 行列の具体的な形を求めるため，したがって同時にこの群の無限小元に対する具体的な表現をつくるために，(27.15) の代数的関係を解くことになるわけである．

一旦 $\mathbf{J}$ 行列がわかれば，(27.12) および (27.13) で与えられる無限小回転の演算子を有限の回転にまで拡張することはやさしいことなのである．そこで，ある有限回転 $\boldsymbol{\phi}$ に対する $U_R(\boldsymbol{\phi})$ を求めたいとしよう．座標軸のえらび方をその中の一つ例えば x 軸が $\boldsymbol{\phi}$ の方向と一致するようにする．その場合，$\boldsymbol{\phi}$ の大きさを ϕ から $\phi+\Delta\phi$ へわずかだけふやすことの効果は有限回転 $U_R(\phi)$ にひきつづいて無限小回転 $1-(i/\hbar)\Delta\phi J_x$ を行なうことであり，したがって次の関係があることになる．

$$U_R(\phi+\Delta\phi)\approx\left(1-\frac{i}{\hbar}\Delta\phi J_x\right)U_R(\phi)$$

つまり $U_R(\phi)$ は次の微分方程式

$$\frac{dU_R(\phi)}{d\phi}=-\frac{i}{\hbar}J_xU_R(\phi)$$

を満たすと同時に境界条件 $U_R(0)=1$ を満たすことになる．この方程式は容易に積分できて結果は次のようになる．

$$U_R(\phi)=e^{-i\phi J_x/\hbar}$$

$\boldsymbol{\phi}$ に対する x 軸の選び方は何ら結果に対する制限を含むものでない以上，有限回転の演算子として次の演算子が得られる．

$$U_R(\boldsymbol{\phi})=\exp\frac{-i\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}}{\hbar} \tag{27.16}$$

27-6 表示の選び方

ここでリー代数の方程式 (27.15) を §25 で調和振動子に対して用いられたものと類似のやり方で解くことにする．3 個のエルミチアンの力学変数 J_x, J_y, J_z があり，これ

らの中のどの一つをとっても他の任意の一つと交換しない．つまりこれらの中の１個以上のものを同時に対角化することはできない．しかしながらそれらから $\mathbf{J}^2$ をつくることはでき，この $\mathbf{J}^2$ が $\mathbf{J}$ の各成分と交換することは容易にわかる．振動子問題でのエネルギー表示との類推で今度の場合 $\mathbf{J}^2$ と $\mathbf{J}$ の成分の一つ，たとえば J_z が対角型になる表示を選ぶことにする．

振動子の問題において x および p を使って議論するよりも $p\pm im\omega_c x$ を使って議論する方がより便利であったのと全く同様に，この場合にも J_x や J_y を使うより $J_x\pm iJ_y$ を使う方がより便利であるということになる．そこで次の演算子を定義する．

$$J_+=J_x+iJ_y \qquad J_-=J_x-iJ_y \tag{27.17}$$

これらはエルミチアンではないが，互いにエルミット共役になっており振動子問題での昇降の演算子に似た役割を果すことになる．明らかに $J_\pm$ は $\mathbf{J}^2$ と可換になっており，その他の交換関係は次の通りである．

$$[J_z, J_+]=\hbar J_+ \qquad [J_z,\ J_-]=-\hbar J_- \qquad [J_+, J_-]=2\hbar J_z. \tag{27.18}$$

表示の行および列を一対の数 j, m で標示することにする．m は一組のディメンジョンのない実数として J_z の固有値が $m\hbar$ になるように選んでおくのが便利である．しかし j と $\mathbf{J}^2$ の固有値との間の関係は一応未定のままにしておくことにして，これらの固有値を $f(j)\hbar^2$ と書いておくことにしよう．ただし，$f(j)$ は j のディメンジョンのないある関数である．そうすればこの表示での $\mathbf{J}^2$ および J_z に対する行列は次のようになる．

$$\langle jm|\mathbf{J}^2|j'm'\rangle=f(j)\hbar^2\delta_{jj'}\delta_{mm'} \qquad \langle jm|J_z|j'm'\rangle=m\hbar\delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{27.19}$$

さらに $J_\pm$ は $\mathbf{J}^2$ と可換であるから，m については対角型でないにしても j については対角型になっている．

(27.18) の最初の方程式はこの表示で次のように書き表わすことができる．

$$\langle jm|J_z|j'm'\rangle\langle j'm'|J_+|j''m''\rangle-\langle jm|J_+|j'm'\rangle\langle j'm'|J_z|j''m''\rangle$$
$$=\hbar\langle jm|J_+|j''m''\rangle$$

ただしここでは j' と m' についての和の記号は明示しないでおくことにする．もしも $f(j)=f(j')=f(j'')$ でなければこの方程式の両辺は零となる．したがって (27.19) の二番目の方程式を使って次の関係が得られる．

$$(m-m''-1)\langle jm|J_+|jm''\rangle=0 \tag{27.20}$$

つまり $\langle jm|J_+|jm''\rangle$ が零にならないのは $m=m''+1$ の場合に限られているわけである．このことはケット $|jm''\rangle$ に J_+ を作用させた結果はケット $|j, m''+1\rangle$ のある倍数であることを意味しており，したがって J_+ は J_z の固有値についての上昇演算子になっている．同様なやり方で，(27.18) の第二の方程式から次の関係が導かれる．

$$(m-m''+1)\langle jm|J_-|jm''\rangle=0 \tag{27.21}$$

したがって，J_- は J_z の固有値についての下降演算子になっている．

要するに J_+ およびそのエルミット共役の J_- の零でない行列要素を次のような形に書くことができる．

$$\langle j, m+1|J_+|jm\rangle=\lambda_m\hbar \qquad \langle jm|J_-|j, m+1\rangle=\lambda_m{}^*\hbar \tag{27.22}$$

(27.22) の行列要素を (27.18) の三番目の方程式に代入してみればわかるように，対角線からはずれている行列要素は両辺とも零で，のこる対角線要素の代表的なものは

$$|\lambda_{m-1}|^2-|\lambda_m|^2=2m \tag{27.23}$$

となる．λ_m は m と同時に j を含んでいてもよいということは注意されるべきである．

27-7　$m, f(j)$ および λ_m の値

方程式 (27.23) は $|\lambda_m|^2$ についての一次線型の差分方程式になっており，その一般解は1個の任意定数を含む．すなわち

$$|\lambda_m|^2=C-m(m+1) \tag{27.24}$$

ところで $|\lambda_m|^2$ は必ず正かあるいは零であるのに，(27.24) の右辺は明らかに m の十分大きな正または負の値に対して負の値をとる．もしも $\lambda_m=0$ になるような m の2つの値 m_1 および m_2 が存在し，さらにもしもこれらの2つの値がお互いにある整数だけ異なっているならば，このことは何ら困難を生じないのである．というのは，もしこのようになっているとすれば，逐次の項が1だけ異なっている m の値の系列は，$|\lambda_m|^2$ が負にならない内に両端で切れることが可能であるからである．つまり，m の値の上端 $(m=m_1)$ で方程式 (27.20) が満たされているということは，J_z の固有値を $m_1\hbar$ より大きな値にすることによってではなくむしろ $\langle j, m_1+1|J_+|jm_1\rangle=0$ にすることによって可能になる．同様に下端 $(m=m_2)$ では，J_z の固有値を $(m_2+1)\hbar$ より小さくすることによってではなく $\langle jm_2|J_-|j, m_2+1\rangle=0$ にすることによって方程式 (27.21) を満足させることができる．明らかに $|\lambda_m|^2$ は m_2+1 から m_1 まで両端を含めた区間の

mの値に対して負にはならない.

要するに, m_1 および m_2 をそれぞれ2次方程式 $C-m(m+1)=0$ の二根の中の大きい方および小さい方, すなわち

$$m_1=-\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}(1+4C)^{\frac{1}{2}} \qquad m_2=-\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}(1+4C)^{\frac{1}{2}}$$

とすれば, m_1 からはじまって単位間隔で m_2+1 まで減少してゆく有限個のm値の系列が得られる. m_2+1 は $-m_1$ に等しいから, mの値の系列は m_1 から始まって単位間隔で $-m_1$ にまで達することになる. このことは, $2m_1$ がある正の整数あるいは零であることを意味している. 結局 m_1 は 0, $\frac{1}{2}$, 1, $\frac{3}{2}$……という値の系列に限られることになり, かつ $C=m_1(m_1+1)$ である.

$f(j)$ を算出するために, $\mathbf{J}^2=\frac{1}{2}(J_+J_-+J_-J_+)+J_z^2$ の jm 対角要素を計算してみる. (27.24) を使って, その結果は次のようになる.

$$\begin{aligned} f(j)\hbar^2&=\tfrac{1}{2}|\lambda_{m-1}|^2\hbar^2+\tfrac{1}{2}|\lambda_m|^2\hbar^2+m^2\hbar^2\\ &=C^2\hbar^2=m_1(m_1+1)\hbar^2 \end{aligned}$$

ここである与えられたmの値の系列での最大値である m_1 のよび方をかえて, それを j とよぶことにする. その結果 $\mathbf{J}^2$ の固有値は $j(j+1)\hbar^2$ となる. ただし, jは零またはある正の整数またはある奇数の½の値をとる. これらの j の値のそれぞれに対して, j から始まって単位間隔で $-j$ におわる $2j+1$ 個のmの値が存在する. 昇降演算子の零にならない行列要素は (27.22) および (27.24) の方程式から求められ, それらは次のような種々のお互いに同等な仕方で書き表わすことができる:

$$\begin{aligned} \langle j,m+1|J_+|jm\rangle&=[j(j+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar\\ &=[(j-m)(j+m+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar\\ \langle j,m-1|J_-|jm\rangle&=[(j(j+1)-m(m-1)]^{\frac{1}{2}}\hbar\\ &=[(j+m)(j-m+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar \end{aligned} \qquad (27.25)$$

$$J_z|jm\rangle=m\hbar|jm\rangle$$

$$J_\pm|jm\rangle=[j(j+1)-m(m\pm1)]^{\frac{1}{2}}\hbar|j,m\pm1\rangle$$

ただし, 慣用にしたがって任意の位相因子は1に等しいとしてある.

27-8 角運動量の行列

以上のように $\mathbf{J}^2$ と J_z が対角型になっている表示を選ぶと, それに対応する標号(ラベル) j,m

に対して離散的な数値の系列がいろいろ導かれてくるわけである．このようにして得られた無限個の行列を取り扱う最も便利なやり方は，それらを，ある特定の j の値によって規定され $2j+1$ 行 $2j+1$ 列の有限行列の無限個の組に組み分けしてみることである．$j=0$ に対しては $\mathbf{J}^2$ も $\mathbf{J}$ の諸成分もすべて次数が 1 の零行列（0）で表現される．その次にくる j の 3 個の値に対する三組の行列は（27.17）および（27.25）を使えば求められ，次のようになる．

$j=\frac{1}{2}$：

$$J_x=\tfrac{1}{2}\hbar\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}\qquad J_y=\tfrac{1}{2}\hbar\begin{bmatrix}0&-i\\i&0\end{bmatrix}$$

$$J_z=\tfrac{1}{2}\hbar\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\qquad \mathbf{J}^2=\tfrac{3}{4}\hbar^2\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}$$

$j=1$：

$$J_x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\qquad J_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{bmatrix}$$

$$J_z=\hbar\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix}\qquad \mathbf{J}^2=2\hbar^2\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}$$

$j=\frac{3}{2}$： (27.26)

$$J_x=\tfrac{1}{2}\hbar\begin{bmatrix}0&\sqrt{3}&0&0\\\sqrt{3}&0&2&0\\0&2&0&\sqrt{3}\\0&0&\sqrt{3}&0\end{bmatrix}$$

$$J_y=\tfrac{1}{2}\hbar\begin{bmatrix}0&-i\sqrt{3}&0&0\\i\sqrt{3}&0&-i2&0\\0&2i&0&-i\sqrt{3}\\0&0&i\sqrt{3}&0\end{bmatrix}$$

$$J_z=\tfrac{1}{2}\hbar\begin{bmatrix}3&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-3\end{bmatrix}\qquad \mathbf{J}^2=\tfrac{15}{4}\hbar^2\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}$$

27-9 球関数との関連

以上の結果を§14の結果と比較してみると，j がある整数値 l になっている角運動量の

行列と方程式（14.16）で定義されている l 次の球関数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ との間に密接な関連がありそうに思われる．実際，（14.22）および（14.23）の固有値方程式はそれぞれ行列 $\mathbf{J}^2$ および J_z の対角化された形式と両立するものになっている．さらに演算子 $J_\pm$ は（14.20）を利用して次のような微分演算として表わすことができる：

$$J_+=\hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$
$$J_-=\hbar e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{27.27}$$

ここで§14で議論された球関数の性質を使えば，次の関係を証明することができる．

$$J_+Y_{lm}(\theta,\phi)=[l(l+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar Y_{l,m+1}(\theta,\phi)$$
$$J_-Y_{lm}(\theta,\phi)=[l(l+1)-m(m-1)]^{\frac{1}{2}}\hbar Y_{l,m-1}(\theta,\phi) \tag{27.28}$$

この結果は（27.25）から当然予想されるものである．

§23で説明しておいた変換理論に従えば，球関数を角運動量表示から角座標表示への一つのユニタリー変換を構成するものとみなすことができることは明らかである．すなわち

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=\langle\theta\phi|lm\rangle \tag{27.29}$$

（27.29）の方程式を利用する際，角座標の積分を実行する場合にはいつでも重みの関数 $\sin\theta$ を含ませておかなければならないということを覚えておく必要がある．

27-10　スピン角運動量

軌道角運動量 $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$ は座標と運動量を使って表わされている以上，$\mathbf{L}^2$ という量は一般に運動の定数にはならない．したがって量子数 l ははっきりと定義されている必要もなければ，またごく制限された事情の下にある場合を除いてある粒子を規定するために用いることができない．しかしながら，ある角運動量 $\mathbf{S}$ が（27.15）の基本的な交換関係を満たすと同時に $\mathbf{S}^2$ がすべての力学変数と可換であるようにすることは可能である；そのための一つの必要条件は，この $\mathbf{S}$ が $\mathbf{r}$ と $\mathbf{p}$ を使って表わされないということである．このとき $\mathbf{S}^2$ は厳密に運動の定数になっており，s をある整数または半整数として $s(s+1)\hbar^2$ という数によって置き換えることができる．この種の固有スピン角運動量の一つの例はすでに示しておいた．つまりベクトル波動関数は $s=1$ の場合になってい

たわけである．予想されるように，この波動関数は $2s+1=3$ 個の成分をもち，そのスピン行列（27.11）は（27.26）の行列で $j=1$ に対応するものと本質的には同じものである．つまり後者の行列は一つのユニタリー変換によって前者から得ることができ，この変換はこのベクトル波動関数の成分を組みかえる効果をもつものに他ならないのである（問題7を見よ）．

電子，陽子，中性子，中性微子（ニュートリノ）およびミュー中間子（ミューオン）はそれぞれ $s=\frac{1}{2}$ で光子は $s=1$，パイ中間子（パイオン）は $s=0$ であることが実験的に知らされている．なおこれら以外に，スピン角運動量の確定値によって規定される寿命の短い粒子および粒子の集合体がある[1]．

27-11 被 覆 群

j の半奇数値に対応する角運動量行列は純粋の軌道角運動量を表現することはできず，したがってそれが自然において現われるのはスピンに関連してのみ可能なのである．$j=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \cdots\cdots$ をもつ1個の粒子または粒子系は次のような興味ある性質をもっている．この種の系のある状態が 2π ラジアンだけ回転されるとしよう．便宜上回転の軸を z 軸になるように選び，（27.16）を使ってこの回転の演算子を計算すると

$$U_R(2\pi)=e^{-2\pi iJ_z/\hbar}$$

となる．J_z の行列は（27.26）に与えられているように対角型になっているから，$U_R(2\pi)$ もまた対角型で，m を半整数として固有値 $e^{-2\pi im}$ をもつ．つまり，$U_R(2\pi)$ は単位行列の－1倍に等しい．この結果は任意の軸の周りの 2π ラジアンの回転に対して適用できる．というのは，その任意の方向における $\mathbf{J}$ の成分が対角型になっているように選ぶことは常に可能であるからである．

結論として，ある半整数スピンの粒子を 2π ラジアンだけ回転するということは，その状態関数の符号を変えることになる．整数スピンの粒子は 2π の回転によっては変化しないのに対し，半整数スピン粒子の方は元の状態にもどるには 4π の回転が必要になるわけである．$s=\frac{1}{2}$ の粒子が実際に自然界にあらわれている以上，この結果を一つ

1）たとえば次のものを見よ．K. Nishijima, "Fundamental Particle" (Benjamin, New York, 1964)；S. Gasiorowicz, "Elementary Particle Physics" (Wiley, New York, 1966) の第Ⅲ章：A. H. Rosenfeld, A Barbaro-Galtieri, W. J. Podolsky, L. R. Price, P. Soding, C. G. Wohl, M. Roos and W. J. Willis, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 1 (1967)

の数学的な奇妙な事実として無視することはできないのである．ただし，経験との矛盾がみられないということは次の事実の結果なのである．すなわち，波動関数それ自身は直接測定可能な量ではなく，むしろ波動関数を組み合わせた双一次形式が測定の結果にあらわれるのであり，この種の量は 2π の回転に際しても符号を変えないのである．

要するに，**J** あるいは $U_R(\phi)$ を表現するのに利用できる行列の中の半分は，ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ に関して二価になっていることがわかる．このことから思いつくのは，2π の回転だけで異なっている $\boldsymbol{\phi}$ を区別することにすれば，これらの表現を一価にすることができるはずだということである．それには，たとえばこれらのベクトルの終点を含んでいる半径 π の球を半径 2π の球に拡大してやればよい．前にも注意したように，群空間に対する重みの関数は球の全体を通じて一定になっているわけではないが，このようにすれば回転群の 2 倍の個数の元素をもつ新しい群に対する一つの幾何学的同型がつくられる．元の回転群は二重連結になっているが，この新しい群は，半径 2π の球の全表面がこの群の単一の元素に対応している以上，単連結になっていることがわかる．この新しい群は回転群の**普遍被覆群** ***universal covering group*** または単に**被覆群** ***covering group*** とよばれる．この群は回転群に対して**類型** ***homomorphic*** になっているといわれるが，それは被覆群の各元に対しては回転群の一つかつ唯一つの元が対応しているが，回転群の元の各々に対しては被覆群の少なくとも一つ（実際には 2 個）の元が対応しており，両者の間には群としての乗法に関する対応が存在しているからである[1]．

27-12 二次元ユニタリー群および特殊ユニタリー群

回転群の生成元の零でない表現の中で最低次数のものは方程式（27.26）の最初の 3 個の行列である．それらを次の形に書く．

$$\mathbf{J}=\tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$$

$$\sigma_x=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\qquad \sigma_y=\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix}\qquad \sigma_z=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\qquad (27.30)$$

この σ は **Pauli** のスピン行列（*Pauli spin matrices*）とよばれているが，それはこれらが電子スピンに関連して始めて導入されたからである[2]．（27.16）および（27.30）

---

1) Wigner，前掲書 p.249.〔邦訳書，299頁〕

2) W. Pauli；*Z. Physik* **43**, 601 (1927)；電子スピンについては第41節でより詳しく議論する．

に従ってつくられた $U_R(\boldsymbol{\phi})$ は二行二列になり，ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ に関して二価である．したがって Pauli の行列は被覆群の一つの表現をつくる．**J** がエルミチアンである以上，$U_R(\boldsymbol{\phi})$ がユニタリーであることは明らかである．

すべての二行二列のユニタリー行列の集合は，行列の掛算を結合規則としてもつ一つの群を形成していることは容易にわかる．これが二次元のユニタリー群で，$U(2)$ で表わす．ただし，この群はすべての実ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ について (27.16) および (27.30) を使ってつくられる行列 $U_R(\boldsymbol{\phi})$ の群よりは大きい．というのは，$U_R(\boldsymbol{\phi})$ の指数にあらわれる行列は零の跡をもっているからである．ところで，(22.22) から

$$\det(e^A)=e^{\mathrm{tr}\,A} \tag{27.31}$$

である．$\boldsymbol{\sigma}$ の各成分の跡は零であるため，$U_R(\boldsymbol{\phi})$の行列式は単位行列式になる．つまりこの被覆群は，**特殊ユニタリー群** *special unitary group* あるいは**ユニモジュラなユニタリー群** *unitary unimodular group* とよばれるものになり，$SU(2)$ と書かれる．これは +1 に等しい行列式をもつすべての 2 行 2 列のユニタリー行列の集合である．ユニモジュラという性質は行列の掛け算において維持されるから，これらの行列は実際に一つの群を形成しているわけである．

27-13 群 $U(n)$ および $SU(n)$

n 行 n 列のユニタリー行列はHを一つのエルミット行列として，次の形に書くことができる．

$$U=e^{iH}$$

このような行列Uの全体は，明らかに行列の掛け算を結合則とする一つの群をつくっており，$U(n)$ で示される．Hの対角行列要素は実数で，主対角線に関して対象的な位置にある非対角要素は互いに複素共役になっている．つまり，H したがってUも n^2 個の独立なパラメーターで規定される．この群 $U(n)$ が連続連結の n^2-パラメーターのコンパクトな Lie 群であることは容易に示される．

任意のエルミット行列の跡は実数で，かつ任意のユニタリー行列の行列式は大きさ 1 の複素数である．その結果，方程式 (27.31) および (27.32) によって，

$$\mathrm{tr}\,H=\alpha, \qquad \det U=e^{i\alpha} \qquad \alpha:\text{実数} \tag{27.33}$$

となる．結局，もしもUの行列式が +1 に等しいことを要求するとすれば，それは $\alpha=0$

(mod 2π) ということであり，したがって n^2 個のパラメーターに対して単一個の条件が課せられることになる．これらの行列もやはり，連続連結のコンパクトな Lie 群を形成する．この群は $SU(n)$ と書かれ，(n^2-1) 個のパラメーターをもつ．$SU(n)$ の各メンバーは明らかに $U(n)$ の一つのメンバーにもなっているが，その逆は正しくない．その意味で $SU(n)$ は $U(n)$ の一つの**部分群** *subgroup* であるといわれる．

$SU(n)$ の一つのメンバーを U_0 と書く．ただし

$$U_0=e^{iH_0},\qquad \mathrm{tr}(H_0)=0\qquad \det(U_0)=1 \tag{27.34}$$

とする．そうすると，(27.32) および (27.33) の性質をもつ $U(n)$ の一つの代表的なメンバーから，次のようにしてそれに対応する一つの行列 U_0 をつくることができる．

$$H=H_0+\frac{\alpha}{n}\mathbf{1}\qquad U=(e^{i\alpha/n}\mathbf{1})U_0=U_0(e^{i\alpha/n}\mathbf{1})$$

ただし，$\mathbf{1}$ は n 次元の単位行列で U_0 と H_0 は (27.34) によって結びつけられている．数 $e^{i\alpha/n}$ は一行一列のユニタリー行列で，群 $U(1)$ を構成する．また n 行 n 列の行列 $e^{i\alpha/n}\mathbf{1}$ は明らかに n 次元行列による $U(1)$ の行列表示をつくっている．結局，$U(n)$ の任意のメンバーは $U(1)$ のある適当なメンバーと $SU(n)$ のメンバーとの行列積として書き表わすことができる．

容易にわかるように，$n<m$ のとき $U(n)$ は $U(m)$ の一つの部分群であり，$SU(n)$ は $SU(m)$ の一つの部分群になる．$U(n)$ の任意のメンバー U の行および列を次のようなやり方で水増しすることによって，それを一つの m 行 m 列の行列に拡大することができる．

$$\begin{bmatrix} U & \bigcirc \\ \bigcirc & \mathbf{1} \end{bmatrix} \tag{27.35}$$

ここで $\mathbf{1}$ は $(m-n)$ 行 $(m-n)$ 列の単位行列で，$\bigcirc$ は長方形の零行列である．U に対応するエルミット行列 H も同じようなやり方で次のような行列に拡大することができる．

$$\begin{bmatrix} H & \bigcirc \\ \bigcirc & \bigcirc \end{bmatrix} \tag{27.36}$$

明らかに (27.35) と (27.36) は方程式 (27.32) で結びつけられている．つまり，$U(m)$ の行列の中の特別な部分集合が $U(n)$ の一つの行列表現をつくっているわけである．同様なことは $SU(m)$ と $SU(n)$ に対しても言える．

27-14 $U(n)$ および $SU(n)$ の生成元

任意の Lie 群の生成元は，方程式 (27.6) と類似に単位元に無限に近いその群の元を使って定義される．つまり，その群が s 個のパラメーターをもっているとすれば，s 個の生成元 λ_j は s 個の無限小パラメーター ϕ_j を使って，その群の一つの無限小元

$$\mathbf{1}+i\sum_{j=1}^{s}\phi_j\lambda_j$$

をきめる．$U(n)$ に対しては，n 行 n 列で一次独立な n^2 個のエルミット行列のどれでもを任意に生成元と考えることができる．この種の行列の任意の一組の交換関係の i 倍もやはりエルミット行列である．したがってそれを生成元の一次結合として表わすことができる．したがって $U(n)$ の Lie 代数は閉じている．同様に，$SU(n)$ の生成元も，n 行 n 列で跡が零の互いに一次独立な (n^2-1) 個のエルミット行列の任意の組と考えることができる．この場合にもやはり，この種の行列の任意の組の交換関係の i 倍はエルミット行列で跡は零である．したがってこの代数も閉じていることになる．

$n=2$ の場合には，特殊ユニタリー群は $2^2-1=3$ 個のパラメーターをもつことになるが，このパラメーターを実ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ の三つの成分とみなすことができる．この三つの生成元の選び方として便利なのは，(27.30) で定義されているもので，このようにとれば (27.15) の交換関係と両立するわけである．ある群の**階数** *rank* とは互いに可換な生成元の最大数として定義されるが，この定義によれば $SU(2)$ は階数 1 の群である．

この節の始めの方で説明しておいたように，ある Lie 代数の，したがってまたこの代数によって生成される群の，ある特定の表示を指定するには，できるだけ多数の演算子が対角化されるように選ぶことにするのが便利である．その意味で，(27.14) あるいは (27.15) の交換関係によって定義される $O(3)$ 代数から出発して，(27.19) に示されているように可換な演算子 J_z および $\mathbf{J}^2$ が対角化されているような一つの表現を選んだわけである．その結果 (27.15) の解からは j の整数値と同様に j の半奇数値が得られること，したがって $O(3)$ の被覆群は $SU(2)$ になるということが明らかになったわけである．このように，生成元からつくられた演算子 $\mathbf{J}^2$ は表現を決定する際に本質的な役割を演じたわけである．

Racah[1] の一定理によれば，上にあげた $\mathbf{J}^2$ のような生成元から構成することができ，かつ Lie 群のすべての生成元と可換な演算子の中で独立なものの数は，その群の階数に等しい．生成元の適当な双一次形式をとることによって，常にそのような一つの演算子を形成することが可能であることを最初に明らかにしたのは Casimir[2] であった；その意味でこの種の演算子は **Casimir 演算子** *Casimir operator* とよばれている．$SU(2)$ の階数は1であるから，その唯一の Casimir 演算子が $\mathbf{J}^2$ になるのである．

27-15 群 $SU(3)$

三次元の特殊ユニタリー群は $3^2-1=8$ 個の生成元，$\lambda_1, \ldots, \lambda_8$ をもつ．これらの生成元はいろいろと便利なやり方で選ぶことができる．よく利用される $SU(2)$ ももともと $SU(3)$ の一つの部分群なのであるから，(27.30) の Pauli の行列を (27.36) のやり方に従って二行二列から三行三列に拡大してやれば，$SU(3)$ の生成元であると同時に $SU(2)$ の生成元になっている三つの演算子がきまる．

$$\lambda_1=\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{bmatrix}\quad \lambda_2=\begin{bmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{bmatrix}\quad \lambda_3=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&0\end{bmatrix} \tag{27.37}$$

8個の λ の中のこれら最初の三個は明らかに σ と同じ形の交換関係を満たしている；この関係は次のように書いておくこともできる．

$$[\sigma_i, \sigma_j]=2i\sum_k \epsilon_{ijk}\sigma_k \qquad i, j, k=x, y, z \text{ または } 1,2,3 \tag{27.38}$$

ただし ϵ_{ijk} は完全に反対称な Kronecker 記号で，その零にならない値は次の成分に限られている．

$$\epsilon_{123}=\epsilon_{231}=\epsilon_{312}=-\epsilon_{132}=-\epsilon_{321}=-\epsilon_{213}=1 \tag{27.39}$$

残りの5個の λ はまだまだいろいろなやり方で選ぶことができる．ただし，$SU(3)$ 代数が主として素粒子の分類に応用されている関係上，この問題に関連して採用されている記法に従っておくことにする[3]．

---

1) G. Racah, *Red. Lincei*, 8 (1950), 108; "GroupTheory and Spectroscopy CERN preprint 61—8, 1961 (Institute for Advanced Study, Princeton, N. J. での講義 (1951) のリプリント).

2) H. B. G. Casimir, *Proc. Roy. Soc. Amsterdam* 34 (1931), 844.

3) M. Gell-Mann and Y. Ne'eman, "The Eightfold Way" (Benjamin, New Yok, 1964)

$$\lambda_4=\begin{bmatrix}0&0&1\\0&0&0\\1&0&0\end{bmatrix}\quad \lambda_5=\begin{bmatrix}0&0&-i\\0&0&0\\i&0&0\end{bmatrix}\quad \lambda_6=\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}$$

$$\lambda_7=\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{bmatrix}\quad \lambda_8=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-2\end{bmatrix} \tag{27.40}$$

(27.38) に対応する交換関係が次のものになることは容易に証明できる．

$$[\lambda_i,\lambda_j]=2i\sum_k f_{ijk}\lambda_k \qquad i,j,k=1,\ldots,8 \tag{27.41}$$

ここで f_{ijk} は完全反対称すなわちその添字の任意の二つの入れ換えに際して符号を変えるものとする．そうすれば f_{ijk} の中で零でない値として残るものは，以下に示すものの順序をとったものになる．

$$f_{123}=1 \qquad f_{147}=f_{165}=f_{246}=f_{257}=f_{345}=f_{376}=\tfrac{1}{2}$$
$$f_{458}=f_{678}=\tfrac{1}{2}\sqrt{3} \tag{27.42}$$

結局 f_{123} は (27.39) によって与えられている ϵ_{123} に等しくなるが，このことは予想されたことである．

8 個の生成元の中でお互いに可換になるものは高々 2 個存在し，それらはここでの記法を使えば λ_8 と最初の 3 個の λ の中の一つということになる．したがって $SU(3)$ の階数は 2．その結果，すべての λ と可換な Casimir 演算子は 2 個存在することになる．2 個の Casimir 演算子中の 1 つは

$$C=\sum_{i=1}^{8}\lambda_i{}^2 \tag{27.43}$$

であるが，もう一つは λ の三重一次積 (trilinear) のかなり複雑な和になる[1]．ここで注意すべき重要な点は，$[C,\lambda_i]=0$ という関係は，(27.41) から (27.43) までの演算子方程式を使って確認されねばならないのであって，(27.37) および (27.40) で与えられているような λ の特定の行列表現を使った結果ではないということである．

27-16 座標および運動量を用いた表現

以前に注意しておいたように，$\mathbf{r}$ および $\mathbf{p}$ の各成分が与えられた量子条件を満足しているものとすれば，(27.7) の軌道角運動量演算子は $O(3)$ または $SU(2)$ の生成元に対

1) J. J. de Swart, *Rev. Mod. Phys.* **35**, 916 (1963)

する交換関係 (27.14) を満たす．そうだとすれば，$SU(3)$ の8個の生成元の中の3個を**L**の成分と同じものとすることが可能であろうとは予想されるところである．もし仮にこのようにできたとすると他の5個の生成元もやはり座標と運動量を使って表わすことができるものと期待するのは当然である．この種のものが5個あるのだから，それらにある四重極テンソルの5つの成分を割り当ててみるというのは自然である[1]． このような考え方で進むと $SU(3)$ の8個の生成元の可能な表現として次のような8個の量が考えられることになる：

$$L_x = yp_x - zp_y \qquad L_y = zp_x - xp_z \qquad L_z = xp_y - yp_x$$
$$Q_{xy} = \alpha xy + \beta p_x p_y \qquad Q_{yz} = \alpha yz + \beta p_y p_z \qquad Q_{zx} = \alpha zx + \beta p_z p_x \tag{27.44}$$
$$Q_0 = \frac{\alpha}{2\sqrt{3}}(x^2 + y^2 - 2z^2) + \frac{\beta}{2\sqrt{3}}(p_x{}^2 + p_y{}^2 - 2p_z{}^2)$$
$$Q_1 = \frac{\alpha}{2}(x^2 - y^2) + \frac{\beta}{2}(p_x{}^2 - p_y{}^2)$$

ただし α および β はあるディメンジョンをもつ実数である．

これら8個の演算子についての28個の交換関係は容易に計算されるが，その結果は8個の λ についての交換関係と比較されるべきものである．L_x, L_y および L_z をそれぞれ λ_1, λ_2 および λ_3 の乗数倍と同一視することは，一見根拠のあることと思われるかも知れない．しかしながらその場合，5個のQに対応する λ の一次結合を見つけることが不可能であるということになる．このことの理由は，$SU(2)$ の $SU(3)$ の部分群としてのあり方と，$O(3)$ の $SU(3)$ の部分群としてのあり方との相異からきている．[2] つまり，$SU(2)$ の生成元である (27.30) の Pauli 行列を二行二列から三行三列に拡大した結果が，(27.37) の最初の3個の λ になったのであるが，一方 $O(3)$ が $SU(3)$ の一つの部分群であるという理由は，方程式 (27.2) で与えられている回転行列Rが1に等しい行列式をもつ．三行三列の規格直交行列であり，従って三行三列のユニモジュラなユニタリー行列のある特別の場合になっていたからである．(27.4) のような典型的な無限小回転の表示を (27.37) の形で求めようとしても，λ の行列の第三行および第三列がすべて零から構成をされている以上そのことは明らかに不可能である．また，

1) J. P. Elliot, *Proc. Roy. Soc.* (London) A 245, 128 (1958)

2) H. J. Lipkin, "Lie Groups for Pedestrians" (North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1965) の 4.2 節

$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ は $SU(2)$ の $j=\frac{1}{2}$ の表現を生成するのに対し，座標と運動量を使ってあらわすことのできるのは整数値の j をもつ表現だけであるという事実を思い出してみれば，この結論は驚くべきことではない．

(27.4) を (27.6) に似た

$$R \approx 1 - \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{L}) \qquad \boldsymbol{\phi}：無限小$$

という形に書いてみれば正しいとり方が求められる．つまりこの形を (27.37) および (27.40) と比較すればまず

$$L_x = \hbar\lambda_7 \qquad L_y = -\hbar\lambda_5 \qquad L_z = \hbar\lambda_2 \tag{27.45}$$

が導かれる．残りのとり方は，L および Q の交換関係を λ の交換関係と比較してやれば得られる：

$$Q_{xy} = \hbar\sqrt{\alpha\beta}\,\lambda_1 \qquad Q_{yz} = \hbar\sqrt{\alpha\beta}\,\lambda_6 \qquad Q_{zx} = \hbar\sqrt{\alpha\beta}\,\lambda_4$$
$$Q_0 = \hbar\sqrt{\alpha\beta}\,\lambda_8 \qquad Q_1 = \hbar\sqrt{\alpha\beta}\,\lambda_3 \tag{27.46}$$

(27.43) の Casimir 演算子はこの表示では次のようになる．

$$C = \hbar^{-2}\mathbf{L}^2 + (\hbar^2\alpha\beta)^{-1}(Q_{xy}{}^2 + Q_{yz}{}^2 + Q_{zx}{}^2 + Q_0{}^2 + Q_1{}^2)$$
$$= -3 + (3\hbar^2)^{-1}\left[\left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\mathbf{r}^2 + \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}\mathbf{p}^2\right]^2 \tag{27.47}$$

§30 で三次元の等方的調和振動子の議論に関連して $SU(3)$ のこの座標-運動量表示をもう一度とりあげることにする．

28□角運動量状態の組み合わせとテンソル演算子

前期量子論の中心問題の一つは，ある系の二つの部分に附随している角運動量（たとえば，ある原子内の 2 個の電子の軌道角運動量とか，同一電子のスピンと軌道角運動量とか）を組み合わせて，全系の角運動量を合成することであった．ベクトル模型はこの問題を加法規則を使って解決した．すなわち，二つの角運動量ベクトルの和の大きさは，それぞれの大きさの和（平行の場合）からそれぞれの大きさの差（逆平行の場合）までにわたって整数を階差とする任意の値をもちうる．このことは**三角形の規則** ***triangle rule*** とよばれているが，それは二つの角運動量の大きさとそれらを合成した大きさが一つの閉じた三角形（ただし面積が零でありうる）をつくらねばならないからである．ま

た，ベクトル模型によれば，角運動量の z 成分の和はそれらの合成ベクトルの z 成分に等しいとされている．

これらの規則はいずれも量子力学においても依然として正しいのである．まず最初には，2個の可換な角運動量演算子の固有状態の積の一次結合で，全角運動量の固有状態になっているものに対してこの二つの規則が適用されることを示す．次には，同じ種類の合成公式が回転，またはテンソル演算子の積に対しても，またある角運動量の固有状態にあるテンソル演算子を作用させたときに生じる状態に対しても成立することを示す．

任意の個数の角運動量固有状態とテンソル演算子を組み合わせることも，この節で説明されている方法に従ってそれらを一度に2個ずつ組み合わせてゆくことにすれば可能であることは明らかである．ただし，3個またはそれ以上の角運動量状態を直接組み合わせる類似の手続きもやはりつくりあげられている[1)]．

28-1　全角運動量の固有値

2個の可換な角運動量演算子 $\mathbf{J}_1$ と $\mathbf{J}_2$ から出発する；つまり $\mathbf{J}_1$ のすべての成分は $\mathbf{J}_2$ のすべての成分と交換し，かつ $\mathbf{J}_1$ および $\mathbf{J}_2$ はそれぞれ別々に (27.15) の交換関係を満たしているとする．$\mathbf{J}_1^2$ および J_{1z} の規格直交固有状態は $|j_1m_1\rangle$ で，$\mathbf{J}_2$ はこれらの状態には作用しない．同様に，$|j_2m_2\rangle$ は $\mathbf{J}_2^2$ および J_{2z} の規格直交固有状態で，$\mathbf{J}_1$ はこれらの状態には作用しない．この表示は，その一つ一つはケット $|j_1m_1\rangle$ とケット $|j_2m_2\rangle$ の積になっているケット $|j_1m_1j_2m_2\rangle$ の規格直交系によって指定されている．ただし，これらのケットを指定するために必要かもしれない何か他のパラメーターがあっても，以下の議論ではそれらを無視しておくことができる．

$\mathbf{J}_1$ と $\mathbf{J}_2$ とが可換である以上，全角運動量 $\mathbf{J}=\mathbf{J}_1+\mathbf{J}_2$ もまた (27.15) を満たす．$\mathbf{J}^2$ と J_z の規格直交固有状態は $|jm\rangle$ で，これらが第二の表示を指定する．求めたいのは，これらの表示の一方から他方へ移すユニタリー変換（ヒルベルト空間における軸の回転）である．ただし，無限次元のヒルベルト空間の全体を始めから問題にする必要はない．その代りに j_1 と j_2 とが確定値をもっている部分空間を考える；この部

1)　たとえば次を見よ．A. R. Edmonds, "Angular Momentum in Quantum Mechanics" (Princeton, Princeton, N. J. 1957)，第6章．

分空間の次元数は $(2j_1+1)\times(2j_2+1)$ である．この制限をつけておけば，第一の表示のケットは単に $|m_1m_2\rangle$ と書いておいてよく，結局ユニタリ変換 $\langle m_1m_2|jm\rangle$ を求めることが議論の目的になる．ところで (23.4′) の一番目の方程式からの類推でわかるように，この場合次の関係が成立する．

$$|jm\rangle=|m_1m_2\rangle\langle m_1m_2|jm\rangle \tag{28.1}$$

ただし，右辺は m_1 についての $-j_1$ から j_1 までの和，m_2 についての $-j_2$ から j_2 までの和を意味する．

$J_z=J_{1z}+J_{2z}$ であるから，$\langle m_1m_2|jm\rangle$ は $m=m_1+m_2$ となっていない限り零であることは明らかである．この節の冒頭であげておいたベクトル模型の第二の法則は，このことから直ちに与えられる．さらに，m の最大値は j_1+j_2 で，この値は $m_1=j_1$ かつ $m_2=j_2$ の場合に限って一回だけおこっていることもわかる．このことは j の最大値が j_1+j_2 であって，そのような状態が唯一つだけ存在することを示している．m のその次に大きな値は j_1+j_2-1 で，この値は 2 回おきる；つまり $m_1=j_1$ かつ $m_2=j_2-1$ のときと，$m_1=j_1-1$ かつ $m_2=j_2$ のときである（ただし j_1 および j_2 はいずれも零でないとする）．これら二つの状態からつくられる 2 個の一次独立な組み合わせの中の一つは，j が j_1+j_2 になっている新しい状態に属していなければならない．なぜならばこの j の値に対しては j_1+j_2 からはじまって整数の階差で $-j_1-j_2$ にわたる m の値が存在しなければならないからである．組み合わせのもう一方が j のこの値あるいはこれより大きな値に属するということはありえない．なぜならば，この場合にもやはり存在することになるような大きな m の値は現実には存在していないからである．したがって第二の組み合わせは $j=j_1+j_2-1$ に属しており，この j の値をもつ唯一つの状態が存在することになる．この種の議論を進めてゆけば，j_1+j_2 から整数階差で $|j_1-j_2|$ までのそれぞれの j 値は丁度一回だけあらわれていることがわかる．このことはベクトル模型の三角形の法則を確認するものである．

新しい表示の j の値は，それぞれに元の固有状態の $(2j+1)$ 個の一次独立な組み合わせを伴なっていたわけである．したがって固有状態 $|jm\rangle$ の数は

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}(2j+1)$$

となり，この和は予想通り $(2j_1+1)(2j_2+1)$ に等しくなっている．

28-2 Clebsch-Gordan 係数

ユニタリー行列 $\langle m_1m_2|jm\rangle$ の行列要素は，(28.1) によれば固有状態 $|jm\rangle$ の固有状態 $|m_1m_2\rangle$ を用いた展開の係数になっている．これらは **Clebsch-Gordan の係数**とか **Wigner の係数**とかあるいは**ベクトル結合の係数** *Clebsch-Gordan, Wigner or vector-coupling coefficient* とかよばれている．(28.1) に対して逆の展開は

$$|m_1m_2\rangle=|jm\rangle\langle jm|m_1m_2\rangle$$

となる．ただし右辺は，m について $-j$ から j までの和，j について $|j_1-j_2|$ から j_1+j_2 までの和を意味する．この変換行列のユニタリー性は (23.9′) および (23.29) に類似の方程式を通じて表現されることになる．すなわち

$$\begin{aligned}\langle m_1m_2|jm\rangle\langle jm|m_1'm_2'\rangle&=\langle m_1m_2|m_1'm_2'\rangle\\ \langle jm|m_1m_2\rangle\langle m_1m_2|j'm'\rangle&=\langle jm|j'm'\rangle\\ \langle jm|m_1m_2\rangle&=\langle m_1m_2|jm\rangle^*\end{aligned}\tag{28.2}$$

方程式 (28.2) の中の最初の二つの右辺は (Kronecker の δ 記号の積としての) 単位行列に他ならない．また慣用にしたがって，行列要素を実数に選んでおくことにすれば，方程式 (28.2) の第三式の右辺の * 記号はおとしておいてよいことになる．

Clebsch-Gordan 係数に対する具体的な公式をつくることは可能である[1]．しかし，この種の公式はとても複雑なものになるので，むしろ特定の場合について必要に応じて係数をつくってみるか，あるいは刊行されている表を引用するかした方が一般的にはより簡単である[2]．以下ではまず二つの漸化関係式を導いた後，いくつかの簡単の場合の係数をつくってみることにする．

28-3 漸化関係式

方程式 (27.17) で定義された角運動量の上昇演算子 J_+ を方程式 (28.1) の左辺に作用させ，その右辺にはそれと同等の演算子 $J_{1+}+J_{2+}$ を作用させてみる．方程式 (27.25) の第一式を使いかつ両辺を $\hbar$ で割ってやれば，次の関係を得る．

---

1) Edmonds, 前掲書, pp. 44—45

2) 1957年までに刊行された表のリストは Edmond (前掲書) の50頁に与えられている；なお次のものを見よ．M. Rotenberg, R. Bivins, N. Metropolis and J. K. Wooten, Jr., "The 3-j and 6-j Symbols" (Technology Press, Cambridge, Mass, 1959)．先にあげた Rosenfeld 等の論文には，取りはづしのできる一覧カード (wallet card) にまとめた形でいくつかの j_1, j_2 の値に対する行列が与えられている．

$$[j(j+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}|j,m+1\rangle$$
$$=\{[j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)]^{\frac{1}{2}}|m_1+1,m_2\rangle$$
$$+[j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)]^{\frac{1}{2}}|m_1,m_2+1\rangle\}\langle m_1m_2|jm\rangle$$

ここで左辺の $|j,m+1\rangle$ を (28.1) を使って書き直すことができる．右辺については，第一項の m_1 についての和は $m_1'=m_1+1$ についての和に置き換えてもよいことに注意する；ただしすぐわかるように，和をとる際の m_1' についての範囲もやはり $-j_1$ から j_1 までと見なすことができる．右辺の第二項についても同様で，m_2 についての和を m_2+1 についての同じ範囲の和でおきかえてもよいことになる．ケット $|m_1m_2\rangle$ は規格直交系になっているから，ここで両辺の $|m_1m_2\rangle$ の係数を等しいとおくことができ，その結果次の関係が得られる．

$$[j(j+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}\langle m_1m_2|j,m+1\rangle$$
$$=[j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)]^{\frac{1}{2}}\langle m_1-1,m_2|jm\rangle$$
$$+[j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)]^{\frac{1}{2}}\langle m_1,m_2-1|jm\rangle \qquad (28.3)$$

J_+ の代りに J_- から出発してこの手つづきを繰り返すこともできる．その結果は次のようになる．

$$[j(j+1)-m(m-1)]^{\frac{1}{2}}\langle m_1m_2|j,m-1\rangle$$
$$=[j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)]^{\frac{1}{2}}\langle m_1+1,m_2|jm\rangle$$
$$+[j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)]^{\frac{1}{2}}\langle m_1,m_2+1|jm\rangle \qquad (28.4)$$

28-4 係数をつくる手つづき

行列 $\langle m_1m_2|jm\rangle$ は $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 個の行および列をもっているが，$m=m_1+m_2$ の値に応じて，別々のつながらない部分行列に分かれてくる．つまり，$m=j_1+j_2$ かつ $j=j_1+j_2$ に応じて一つの 1×1 部分行列が存在するはずである．次に $m=j_1+j_2-1$ かつ j が j_1+j_2 か j_1+j_2-1 のいずれかに対しては 2×2 部分行列が存在することになる．これらの部分行列の階級は最初は1から次へと単位だけ増えていってある最大値にまで達し，1個またはそれ以上の部分行列については同じ値を保つ．その後は単位だけ減っていって最後に到達する 1×1 部分行列は $m=-j_1-j_2$ および $j=j_1+j_2$ の値をもつことになる．これらの部分行列の各々はユニタリーだから，最初の 1×1 部分行

列は大きさが1の一つの数である．便宜上これを +1 と選ぶことにする：すなわち

$$\langle j_1 j_2 | j_1+j_2, j_1+j_2 \rangle = 1 \tag{28.5}$$

次には，（28.4）で $m_1=j_1$，$m_2=j_2-1$，$j=j_1+j_2$，$m=j_1+j_2$ とおいたものを利用する．そうすると右辺の第一項は零となり，さらに（28.5）を使うと次の関係が得られる．

$$\langle j_1, j_2-1 | j_1+j_2, j_1+j_2-1 \rangle = \left(\frac{j_2}{j_1+j_2}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{28.6}$$

同様に（28.4）で $m_1=j_1-1$，$m_2=j_2$，$j=j_1+j_2$，$m=j_1+j_2$ とおいたものを使うと次の関係が得られる．

$$\langle j_1-1, j_2 | j_1+j_2, j_1+j_2-1 \rangle = \left(\frac{j_1}{j_1+j_2}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{28.7}$$

方程式（28.6）と（28.7）によって与えられるのは，$\langle m_1 m_2 | jm \rangle$ 中の 2×2 の部分行列の半分，つまり $m=j_1+j_2-1$，$j=j_1+j_2$ に対応する部分行列である．$m=j_1+j_2-1$，$j=j_1+j_2-1$ に対応する残りの半分を得るには，第二の規格直交関係（28.2）を利用すればよい．ただしこの場合にも大きさ1の乗数因子の任意性があるが，それは次のような結果になるように選ぶことにする．

$$\begin{aligned} \langle j_1, j_2-1 | j_1+j_2-1, j_1+j_2-1 \rangle &= \left(\frac{j_1}{j_1+j_2}\right)^{\frac{1}{2}} \\ \langle j_1-1, j_2 | j_1+j_2-1, j_1+j_2-1 \rangle &= -\left(\frac{j_2}{j_1+j_2}\right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{28.8}$$

ここで用いた規約は $\langle j_1, j-j_1 | jj \rangle$ という形をもつ最初の行列要素が実数かつ正であるとすることである．

次の部分行列も同様なやり方で求めることができる．すなわち，（28.6）と（28.7）を（28.4）の右辺に代入すれば次の関係が得られる．

$$\begin{aligned} &\langle j_1, j_2-2 | j_1+j_2, j_1+j_2-2 \rangle \\ &\qquad = \left[\frac{j_2(2j_2-1)}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}\right]^{\frac{1}{2}} \\ &\langle j_1-1, j_2-1 | j_1+j_2, j_1+j_2-2 \rangle \\ &\qquad = \left[\frac{4j_1 j_2}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}\right]^{\frac{1}{2}} \\ &\langle j_1-2, j_2 | j_1+j_2, j_1+j_2-2 \rangle \\ &\qquad = \left[\frac{j_1(2j_1-1)}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}\right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{28.9}$$

同様に（28.4）と（28.8）とから次の関係が導かれる．

$$
\begin{aligned}
&\langle j_1, j_2-2|j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle \\
&\qquad =\left[\frac{j_1(2j_2-1)}{(j_1+j_2)(j_1+j_2-1)}\right]^{\frac{1}{2}} \\
&\langle j_1-1, j_2-1|j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle \\
&\qquad =\frac{j_1-j_2}{[(j_1+j_2)(j_1+j_2-1)]^{\frac{1}{2}}} \qquad (28.10)\\
&\langle j_1-2, j_2|j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle \\
&\qquad =-\left[\frac{j_2(2j_1-1)}{(j_1+j_2)(j_1+j_2-1)}\right]^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

（28.9）および（28.10）に直交するような係数の規格された組を求めるには，（28.2）の第二式をもう一度使う．ただし，（28.8）を導いたときと同様に，任意の位相因子は，次の係数の中の最初のものが実数でかつ正になるように選ぶことにする；

$$
\begin{aligned}
&\langle j_1, j_2-2|j_1+j_2-2, j_1+j_2-2\rangle \\
&\qquad =\left[\frac{j_1(2j_1-1)}{(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}\right]^{\frac{1}{2}} \\
&\langle j_1-1, j_2-1|j_1+j_2-2, j_1+j_2-2\rangle \\
&\qquad =-\left[\frac{(2j_1-1)(2j_2-1)}{(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (28.11)\\
&\langle j_1-2, j_2|j_1+j_2-2, j_1+j_2-2\rangle \\
&\qquad =\left[\frac{j_2(2j_2-1)}{(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}\right]^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

以上のような係数をつくってゆく手つづきの中での唯一の困難な部分は直交性を使う部分である．この部分は部分行列の階数が増すにつれてだんだんと複雑なものになってくる．しかし直交性を利用することが必要になるのも各部分行列に対して唯一回だけであるので，j_1 および j_2 が特定の数値をとる具体例を計算する方が，たった今考えた一般の場合よりは比較的簡単になる．注意しておきたいのは，第一の漸化関係式の方も，$m=-j_1-j_2$，$j=j_1+j_2$ をもつ 1×1 の部分行列に関するもう一方の端から出発して Clebsch-Gordan の係数をつくってゆくのに利用することができるということである．

28-5 特定の Clebsch-Gordan 係数の例

前に引用しておいた取りはずし可能な一覧カードには，次の七つの場合に対する Clebsch-Gordan 係数をまとめた表が含まれている．

$j_1 = \frac{1}{2} \qquad j_2 = \frac{1}{2}$:

$$
\begin{array}{rr|cccc}
 & & 1 & 1 & 0 & 1 \\
 & & 1 & 0 & 0 & -1 \\
\hline
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 & & & \\
\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & & \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} & \\
-\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \sqrt{\frac{1}{2}} & -\sqrt{\frac{1}{2}} & \\
-\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & & & & 1
\end{array}
\tag{28.12}
$$

$j_1 = 1 \qquad j_2 = \frac{1}{2}$:

$$
\begin{array}{rr|cccccc}
 & & \frac{3}{2} & \frac{3}{2} & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \\
 & & \frac{3}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} \\
\hline
1 & \frac{1}{2} & 1 & & & & & \\
1 & -\frac{1}{2} & & \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} & & & \\
0 & \frac{1}{2} & & \sqrt{\frac{2}{3}} & -\sqrt{\frac{1}{3}} & & & \\
0 & -\frac{1}{2} & & & & \sqrt{\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & \\
-1 & \frac{1}{2} & & & & \sqrt{\frac{1}{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} & \\
-1 & -\frac{1}{2} & & & & & & 1
\end{array}
\tag{28.13}
$$

$j_1 = 1 \qquad j_2 = 1$:

$$
\begin{array}{rr|ccccccccc}
 & & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 0 & 2 & 1 & 2 \\
 & & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -2 \\
\hline
1 & 1 & 1 & & & & & & & & \\
1 & 0 & & \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} & & & & & & \\
0 & 1 & & \sqrt{\frac{1}{2}} & -\sqrt{\frac{1}{2}} & & & & & & \\
1 & -1 & & & & \sqrt{\frac{1}{6}} & \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & & & \\
0 & 0 & & & & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & -\sqrt{\frac{1}{3}} & & & \\
-1 & 1 & & & & \sqrt{\frac{1}{6}} & -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & & & \\
0 & -1 & & & & & & & \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} & \\
-1 & 0 & & & & & & & \sqrt{\frac{1}{2}} & -\sqrt{\frac{1}{2}} & \\
-1 & -1 & & & & & & & & & 1
\end{array}
\tag{28.14}
$$

j_1: $\frac{1}{2}$ 1 1 $\frac{3}{2}$ $\frac{3}{2}$ 2 2

j_2: $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 1 $\frac{1}{2}$ 1 $\frac{1}{2}$ 1

これらの中の最初の三つの場合を，完全な形に直したものをこゝに再録しておく（前頁）．いずれの場合でも，行列の行は（m_1m_2）で標示されており，列は $\begin{pmatrix} j \\ m \end{pmatrix}$ で標示されている．また，点線の外側の行列要素はすべて零に等しい．(28.5) から (28.11) までの結果がこれらの行列と一致することは容易に証明される．

28-6 回転された状態についての行列要素

§26 では任意の一組の状態に対して計算されたある力学変数 Ω の行列要素と，それらの状態が変位をうけたときの同じ演算子の行列要素とを比較しておいた．その結果は方程式 (26.6) で特にはっきりあらわされているように，ベクトル $\boldsymbol{\varrho}$ だけずらされた状態に対する $\mathbf{r}$ の行列要素は元の状態に関する $\mathbf{r}+\boldsymbol{\varrho}$ の対応する行列要素に等しいということであった．同じようなやり方でやれば，問題 5 で示されているように，無限小ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ だけ回転された状態に対する $\mathbf{r}$ の行列要素は，元の状態に関する $\mathbf{r}+\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r}$ の対応する行列要素に等しくなる．

つまり，方程式 (26.6) に類似の形式を使って，無限小回転をうけた演算子 Ω_R を次のものとして定義することができる．

$$\Omega_R = U_R^{\dagger}(\boldsymbol{\phi})\Omega U_R(\boldsymbol{\phi}) \approx \Omega + \frac{i}{\hbar}[(\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}), \Omega] \tag{28.15}$$

ここでは，(27.12) および (27.13) が利用されている．回転された状態に関する Ω の行列要素は元の状態に関する Ω_R の対応する行列要素に等しいわけである．要するにこのことから導かれることは，任意の演算子の回転に関する性質はその演算子と角運動量との交換関係によって決定されるということである．たとえば，**スカラー演算子** ***scalar operator*** とは回転された状態に対しても元の状態に対するのと同一の行列要素をもつ，つまり $\Omega=\Omega_R$ が成立する演算子のことである．この種の演算子に対しては $[\mathbf{J}, \Omega]=0$ となる．もう一つの例として，**ベクトル演算子** ***vector operator*** とは方程式 (28.15) がベクトル $\mathbf{r}$ に対しての (27.3) と同じ形の関係を導くような演算子のことである．したがって問題 6 で示されるように $\mathbf{J}_R \approx \mathbf{J}+\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{J}$ ということは，つまり角運動量もまた予想通りに一つのベクトル演算子であるということに他ならない．

28-7　既約テンソル演算子

回転に関してスカラーやベクトルよりも高次の性質をもつ演算子をつくることも可能である．たとえば，2個のベクトル演算子**A**と**B**とを組み合わせて，9成分の**テンソル演算子** *tensor operator* A_iB_j（ただし，$i, j=x, y, z$）をつくることができる．ただしこれは取り扱うのに便利な形ではないことは，古典物理学における事情と同様である；つまり，この形の代りに常用されているのは，スカラー積とか，ベクトル積つまり2階の反対称テンソルとか，跡が零の2階の対称テンソルとかである．これらのもつ独立な成分はそれぞれ1個，3個および5個である．これら後にあげたものが，それぞれ $l=0, 1, 2$ をもつ球関数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ の回転に関する性質をもっていることが証明できる；これらは**既約テンソル演算子** *irreducible tensor operator* のよばれるものの例になっている．このよび方はこれらが最も簡単な変換性をもっているからである．[1]

方程式（28.15）に関連して注意しておいたように，**J** はある演算子の回転に関する性質を決定する．これらの性質を球関数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ と関係づけるために，$Y_{lm}(\theta,\phi)f(\theta,\phi)$（ただし $f(\theta,\phi)$ は角についてのある任意関数）に **J** を作用させてみる．[2]（14.20）の第三式によれば，J_z は微分演算子 $-i\hbar(\partial/\partial\phi)$ として表わされる．したがって

$$J_z[Y_{lm}(\theta,\phi)f(\theta,\phi)]=f(\theta,\phi)J_zY_{lm}(\theta,\phi)+Y_{lm}(\theta,\phi)J_zf(\theta,\phi)$$

右辺の第一項は $m\hbar Y_{lm}(\theta,\phi)f(\theta,\phi)$ となるから，結局

$$[J_z, Y_{lm}(\theta,\phi)]f(\theta,\phi)=m\hbar Y_{lm}(\theta,\phi)f(\theta,\phi)$$

$f(\theta,\phi)$ は任意であるから，次の交換関係が得られることになる．

$$[J_z, Y_{lm}]=m\hbar Y_{lm} \tag{28.16}$$

同様なやり方で，（27.27）と（27.28）を使うと次の結果が得られる．

$$\left.\begin{aligned}[J_+, Y_{lm}]&=[l(l+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar Y_{l,m+1}\\ [J_-, Y_{lm}]&=[l(l+1)-m(m-1)]^{\frac{1}{2}}\hbar Y_{l,m-1}\end{aligned}\right\} \tag{28.17}$$

前のパラグラフの議論からの類推を使って，ここで既約テンソル演算子を次のように**定義する**ことにする．すなわち，既約テンソル演算子 $\mathbf{T}(k)$（ただし，$k=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2},$

---

1)　より立ち入った議論については U. Fano および G. Racah, "Irreducible Tensorial Sets" (Academic, New York, 1959) を見よ．

2)　これは（24.34）を導き出す際に利用した方法に他ならない．

……）とは $\mathbf{J}$ との間に（28.16）および（28.17）の交換関係と同じ形の交換関係をもつ（$2k+1$）個の演算子 $T(k, q)$（ただし，$q=k, k-1, \cdots\cdots, -k$）の一組である．くわしくいえば，$T(k, q)$ と $\mathbf{J}$ との交換関係は，（28.16）と（28.17）で l あるいは j を k で，m を q でおきかえたもので，次のようになる．

$$\begin{aligned}
&[J_z, T(k, q)] = q\hbar T(k, q)\\
&[J_+, T(k, q)] = [k(k+1)-q(q+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar T(k, q+1)\\
&[J_-, T(k, q)] = [k(k+1)-q(q-1)]^{\frac{1}{2}}\hbar T(k, q-1)
\end{aligned}\tag{28.18}$$

この種の演算子の重要性は，物理的に興味のある演算子の多くをこのような形に表わすことができるという事実から導かれる．たとえば，2^l 重の電気的または磁気的多重極能率の演算子は $k=l$ をもつ一つの既約テンソル演算子になっている．

28-8　テンソル演算子の積

（27.25）が一方では（27.28），他方では（28.18）と極めてよく似た形をとっているということは，角運動量固有状態の場合と同じ規則にしたがって既約テンソル演算子の組み合わせができるだろうということを暗示している．先に説明しておいたように，2個のベクトル演算子の積はさらに簡約可能であるということがある以上，何らかのこの種の規則が実際必要になる．

そこでこの目的のために方程式（28.1）を利用することを考えてみる．この場合の（28.1）に対応するものは，次のものである．

$$T(k, q) = \sum T_1(k_1, q_1)T_2(k_2, q_2)\langle q_1q_2|kq\rangle \tag{28.19}$$

ただし，ここの Clebsch-Gordan 係数 $\langle q_1q_2|kq\rangle$ は $j_1=k_1$ かつ $j_2=k_2$ に対応しており，したがって右辺の和は q_1 については $-k_1$ から k_1 まで，q_2 については $-k_2$ から k_2 までを意味する．前と同様に，J_z, J_+ および J_- を順次作用させてゆく．ただし，（28.1）から漸化関係式を導き出してきた際には，$\mathbf{J}$ を左辺に $\mathbf{J}_1+\mathbf{J}_2$ を右辺に作用させることができた．この場合に類似の手つづきを行なうには次の恒等式

$$[\mathbf{J}, T_1T_2] = [\mathbf{J}, T_1]T_2 + T_1[\mathbf{J}, T_2] \tag{28.20}$$

から出発すればよい．そうすれば（28.19）の両辺について J_z との交換関係をとって，次の関係が得られる．

$$[J_z, T(k, q)] = \sum\{[J_z, T_1(k_1, q_1)]T_2(k_2, q_2)$$

$$+T_1(k_1, q_1)[J_z, T_2(k_2, q_2)]\}\langle q_1q_2|kq\rangle$$
$$=\sum(q_1+q_2)\hbar T_1(k_1, q_1)T_2(k_2, q_2)\langle q_1q_2|kq\rangle$$
$$=q\hbar T(k, q)$$

この際，(28.18) の第一式を T_1 および T_2 に別々に応用した結果，および $\langle q_1q_2|kq\rangle$ が $q_1+q_2=q$ でない限り零になるという事実を利用してある．要するに (28.19) によって定義されているような $T(k, q)$ はまた (28.18) の第一式を満足しているわけである．

次に (28.19) の J_+ との交換関係をとってみる．

$$[J_+, T(k, q)]=\sum\{[k_1(k_1+1)-q_1(q_1+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar T_1(k_1, q_1+1)T_2(k_2, q_2)$$
$$+[k_2(k_2+1)-q_2(q_2+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar T_1(k_1, q_1)T_2(k_2, q_2+1)\}\langle q_1q_2|kq\rangle$$

ただし，ここでは (28.18) の第二式を T_1 および T_2 に対し別々に応用した結果を利用してある．ところで，(28.3) を導いた際と全く同様に，第一項での q_1 についての和は $q_1'=q_1+1$ についての和に置き換えることができ，その際の q_1' に対する和の範囲は q_1 とおなじ $-k_1$ から k_1 までになる．第二項も同じように取り扱うと，次の関係が得られる．

$$[J_+, T(k, q)]$$
$$=\sum\{[k_1(k_1+1)-q_1'(q_1'-1)]^{\frac{1}{2}}\hbar T_1(k_1, q_1')T_2(k_2, q_2)\langle q_1'-1, q_2|kq\rangle+$$
$$[k_2(k_2+1)-q_2'(q_2'-1)]^{\frac{1}{2}}\hbar T_1(k_1, q_1)T_2(k_2, q_2')\langle q_1, q_2'-1|kq\rangle\}$$

ここでダッシユを落した上で，(28.3) の漸化関係式を使って右辺を簡単にすることができ，その結果は次のようになる．

$$[J_+, T(k, q)]=$$
$$\sum[k(k+1)-q(q+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar T_1(k_1, q_1)T_2(k_2, q_2)\langle q_1q_2|k, q+1\rangle$$

次に q を使った (28.19) で q を $q+1$ におきかえたものを代入してやれば，$T(k, q)$ が交換関係 (28.18) の第二式を満足していることがわかる．同様なやり方で，(28.19) の J_- との交換関係から $T(q, k)$ が (28.18) の第三式を満足することがわかる．

このようにして，(28.19) によって定義された $(2k+1)$ 個の演算子 $T(k, q)$ が一つの既約テンソル演算子を構成していることが示されたわけである．なお，(28.19) の展開式は (28.2) の規格直交関係を利用すれば反転させることができ，その結果は $T(k, q)$ がわかっているとした場合に2個の既約テンソルの積を具体的に簡約化した形

が与えられることになる．すなわち

$$T_1(k_1, q_1)T_2(k_2, q_2) = \sum T(k, q)\langle kq|q_1q_2\rangle = \sum T(k, q)\langle q_1q_2|kq\rangle \tag{28.21}$$

右辺の和は，まず q について $-k$ から k まで行ない，次に k について $|k_1-k_2|$ から k_1+k_2 まで行なうものである；また（28.21）の最後の表式は，Clebsch-Gordan の係数が実数であることのために（28.2）の第三式から結論されたものである．

28-9 演算子と固有状態の組み合わせ

最後に，（28.1）および（28.19）の右辺の因子の一つが既約テンソル演算子で他の一つが角運動量固有状態になっている場合について類似の展開式を求めることができる．すなわち

$$|jm\rangle = \sum T_1(k_1, q_1)\,|j_2m_2\rangle\langle q_1m_2|jm\rangle \tag{28.22}$$

この Clebsch-Gordan の係数 $\langle q_1m_2|jm\rangle$ は $j_1=k_1$ と j_2 に対応しており，和は q_1 については $-k_1$ から k_1 まで，m_2 については $-j_2$ から j_2 までとることになる．この方程式に関連しては記法上の二つの点について注釈を加えておいた方がよいように思われる．第一点は，添字 1 および 2 を用いたのは，それらが（28.19）の右辺の最初のテンソル演算子および（28.1）の右辺の二番目の固有関数にそれぞれ対応しているようにするためだということである．第二点は，これまで同様，各状態を指定するために必要とされるかもしれない角運動量量子数以外のパラメーターに対する指示はすべて省略されているということである．この種の他のパラメーターの存在ということは十分考えうることであり，一般にはそのためにたとえばケット $|jm\rangle$ の半径方向の変化がケット $|j_2m_2\rangle$ のそれとは異なるという結果を生じることはありうることである．

この場合に必要な（28.20）に類似の恒等式は次のものになる．

$$\mathbf{J}T_1|j_2m_2\rangle = [\mathbf{J}, T_1]|j_2m_2\rangle + T_1\mathbf{J}|j_2m_2\rangle$$

代数そのものについては，§28-8 での議論と正確に同じに話は進められ，結論として次のことが導かれる．すなわち，ある特定の j および $-j$ と j の間のすべての m に対して（28.22）によって定義された 1 組のケット $|jm\rangle$ はそれらが（27.25）および（27.28）と同様の方程式を満たしている以上，角運動量固有状態になっている．ただしそれらは規格化されていない．なぜならば，$\langle jm|jm\rangle=1$ ということは一般には本当でな

いからである．一方，$|jm\rangle$ が (27.28) のような斉次方程式を満たしているという事実から，$|jm\rangle$ の規格化は，一般には j によるばかりか，さらに k_1, j_2 およびテンソル演算子 $\mathbf{T}_1$ の形にもよるにしても，m にはよらないことがわかる．

28-10 Wigner-Eckart の定理

(28.22) で与えられている $|jm\rangle$ の $T_1(k_1, q_1)|j_2m_2\rangle$ の形での級数展開の式は，Clebsch-Gordan 係数の規格直交性を利用して次のように反転させることができる．

$$T_1(k_1, q_1)|j_2m_2\rangle = \sum |jm\rangle\langle jm|q_1m_2\rangle = \sum |jm\rangle\langle q_1m_2|jm\rangle \tag{28.23}$$

右辺の和は m については $-j$ から j まで，j については $|k_1-j_2|$ から k_1+j_2 までである．最後の表式に到達するには，(28.21) のときと同様に，(28.2) の第三式と Clebsch-Gordan 係数の実数性が用いられている．

ここで (28.23) に左から一つのブラ $\langle j'm'|$ をかけてみる．この $\langle j'm'|$ は角運動量以外のパラメーターを $|jm\rangle$ とは違った形で含んでいるものであってもよい．要するに，

$$j=j' \text{ かつ } m=m' \text{ でなければ} \qquad \langle j'm'|jm\rangle=0$$

という直交関係を使うことができて，その結果次の等式が得られる．

$$\langle j'm'|T_1(k_1, q_1)|j_2m_2\rangle = N(j', k_1, j_2, T_1)\langle q_1m_2|j'm'\rangle$$

$N\equiv\langle j'm'|j'm'\rangle$ は §§28-9 の末尾で触れておいた規格化因子で，m' には関係しない．そこでダッシュをおとし，N を標準的な慣用と一致するように書いておくことにすると次のようになる[1]．

$$\langle jm|T_1(k_1, q_1)|j_2m_2\rangle = (-1)^{k_1-j_2+j}(2j+1)^{-\frac{1}{2}}\langle j\|T_1(k_1)\|j_2\rangle\langle q_1m_2|jm\rangle \tag{28.24}$$

Wigner-Eckart の定理 *Wigner-Eckart theorem*[2] は方程式 (28.24) に含まれている．この定理によれば，この既約テンソル演算子の角運動量固有状態間の行列要素は，$j_1=k_1$ と j_2 に対応する Clebsch-Gordan 係数を通じてのみ三つの m の値 (q_1, m_2 および m) に関係することになる．このことは驚くべき結果ではない．というのは，3 つの m の値は演算子及び二つの状態の座標系に関する方向をきめるものであり，従っ

1) Edmonds, 上掲書 p. 75

2) Wigner, 上掲書 p. 245 ; C. Eckart, *Rev. Mod. Phys.* **2**, 305 (1930)

て行列要素の値に影響するとしてもそれは幾何学的な因子（すなわち Clebsch-Gordan 係数）を通じてのみ影響するはずだからである．したがって行列要素の物理的性質は $\langle j\|\mathbf{T}_1(k_1)\|j_2\rangle$ という因子に含まれていることになる．$\langle j\|\mathbf{T}_1(k_1)\|j_2\rangle$ は**簡約されたまたは二重棒の行列要素** *reduced or double-bar matrix element* とよばれており，演算子および二つの状態に附属した三つの角運動量（k_1, j_2 および j）やテンソル演算子 $\mathbf{T}_1$ の形，さらに二つの状態を指定するのに必要とされる他のパラメーターに関係している．

テンソル演算子の行列要素をこのような因子に分解して考えることは，その計算を著しく簡単にする．物理的な演算子に対しては k_1 はある整数になるから，まず $q_1=0$ とし，さらに $m_2=m=0$ なり $m_2=m=\frac{1}{2}$ なりと適当にとって，(28.24) から簡約された行列要素を計算するのが最も簡単である．そうすれば q_1, m_2 および m の他の組み合わせに対する行列要素は容易に求められる．

Wigner-Eckart の定理の最も重要な結果の一つとして，テンソル演算子の行列要素が必然的に零となる二つの条件があげられる．行列要素の因子として Clebsch-Gordan の係数があらわれることから，この行列要素は $m=q_1+m_2$ でない場合および k_1, j_2, j が三角形の規則を満たしていない場合には零になることがわかる．一つの具体例として，後者の条件から，全角運動量 j をもつ状態にある系は，$l\leq 2j$ でなければ 2^l 重の電気的または磁気的な多重極能率に対して零でない期待値（対角行列要素）をもつことはできないことがわかる．つまり，スピン零の粒子は磁気的双極子能率をもちえず，スピン½の粒子は電気的四重極能率をもちえないわけである．

29□空間反転と時間反転

パリティは本書では大分前に，一次元（§9）および三次元（§14）の Schrödinger 方程式の双方との関連で出てきていた．ポテンシャルエネルギーが座標 $\mathbf{r}$ を $-\mathbf{r}$ で置き換えた際に不変である限り，エネルギー固有関数は $\mathbf{r}$ の符号が変った際に不変であるか，符号を変えるか，すなわち，偶のパリティをもつか奇のパリティをもつか，のいずれかに選んでおくことができる．パリティと空間反転（$\mathbf{r}\to-\mathbf{r}$）という対称操作との関係に対して，§26 の一般的取り扱いを適用することから本節の議論を始めよう．

その次には時間反転という対称操作を考える．保存力の作用の下で運動しているいくつかの粒子に対する古典論的な運動方程式は，時間についての二階の微係数にかかわっている以上，時間の経過の向きの逆転に対して対称になっている．それに対応する量子論的方程式もまた時間反転についての対称性をもつことは当然期待されることである．しかしながら，時間の微係数についてニュートン的方程式が二次であるのに Schrödinger 方程式の方は一次であるという事実は，量子現象の取り扱いに対して新しい，物理的に興味ある特徴を導入することになる[1]．

29-1 空 間 反 転

反転を生じる行列は，(27.2) で定義されたRと類似の次の形のものになる．

$$I=\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

したがって，$I\mathbf{r}=-\mathbf{r}$．Iは実数の規格直交行列ではあるが，その行列式は -1 であるため本来の回転になっていないことは明らかである．-1 に等しい行列式をもつ任意の3行3列の実規格直交行列はIと一つの本来の回転との積としてあらわすことができる．$I^2=1$ であるから，単位行列とIとはそれらだけで，2個の元をもつ一つの**離散的な** *discrete* 群を形成している．

ケット $|\alpha\rangle$ または波動関数 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ によってあらわされる状態にある物理系の反転によって，その系は $|\alpha'\rangle$ または $\psi_{\alpha'}(\mathbf{r})$ であらわされる状態に変化する．この二つの状態の間の関係として，次のものを仮定する．

$$\psi_{\alpha'}(I\mathbf{r})=\omega\psi_\alpha(\mathbf{r}) \tag{29.1}$$

ただし，ω は以下で議論されるべき一つの数である．(29.1) にはこの種の数が導入されることと，それに対応する (26.1)，(26.7)，(27.1) および (27.8) にはそれが見られぬということは，変位や回転の群のもつ連続的な本性とは対照的な反転の群の離散的な本性の結果に他ならない．前の各方程式にも何らかのこの種の数が導入されるとすれば，それらはそれぞれの場合に応じて $\boldsymbol{\varrho}, \tau$ または $\boldsymbol{\phi}$ によって連続的に変化することにならなければならず，またこれらのパラメーターが零に近づくにつれてそれらも1に近

---

1) 空間反転および時間反転のある種の側面についての古典論的な議論については L. I. Schiff, *Physics* 1, 209 (1965) を見よ．

づくはずである．つまりその場合には何らの物理的な結果ももたないことを示すことができる．

29-2 ユニタリー反転演算子

ユニタリな反転演算子 U_I は次式で定義される．

$$U_I|\alpha\rangle=|\alpha'\rangle \qquad \text{または} \qquad U_I\psi_\alpha(\mathbf{r})=\psi_{\alpha'}(\mathbf{r}) \tag{29.2}$$

(29.2) の第二式に (29.1) を代入し，その結果へもう一度 U_I を作用させると次が得られる．

$$U_I\psi_\alpha(\mathbf{r})=\omega\psi_\alpha(-\mathbf{r}) \qquad U_I{}^2\psi_\alpha(\mathbf{r})=\omega^2\psi_\alpha(\mathbf{r}) \tag{29.3}$$

2回の反転によって座標系は元へ戻るから，したがって $U_I{}^2$ はある状態を自分自身にもどすことが予想される．このような事情の際には，その状態がその規格を変えることはあり得ない．ただし単位の大きさの位相因子がかかってくることはありうる．つまり，ω^2 は単位の大きさをもつある数である．このことから，ω もまた単位の大きさをもつある数であることが結論される．それだけでなく，ω はお互いに重ね合わすことのできる，すなわち同一の粒子系の記述に用いうるすべての状態に対して同一でなければならないということもまた真である．たとえば，もしも

$$\psi(\mathbf{r})=\sum_\alpha a_\alpha\psi_\alpha(\mathbf{r})$$

(ただし，a_α はある一組の数係数) とし，そこへ $U_I{}^2$ を作用させると

$$U_I{}^2\psi(\mathbf{r})=\sum_\alpha \omega_\alpha{}^2a_\alpha\psi_\alpha(\mathbf{r})$$

となる．これはもしも $\omega_\alpha{}^2$ がすべて同一でないとすれば一般的には ψ ($\mathbf{r}$) とは異なった一つの状態であるということになる．

そこで ω は粒子の種類のそれぞれに対してある一つの確定値をもつものと仮定することにしよう．すでに§27の末尾近くで注意しておいたように，ある整数スピンの粒子の 2π の回転はその粒子の状態関数を不変にしてゆく．つまり $\omega^2=1$ そして $\omega=\pm1$ となる．半整数スピンの粒子については，(28.1) からわかるように一対のこの種の粒子の状態関数の積を組み合わせて整数角運動量状態をつくることができる．したがってある半整数スピン粒子に対する ω^2 は，ある整数スピン粒子に対する ω の可能な値に等しくなりうるものであることが予想される．後者は ±1 であるから，したがって

半整数スピン粒子としては $\omega=\pm 1,\ \pm i$ をとりうることになる.

29-3 固有パリティ

種々の粒子に対して ω を実験的に決定するには，それらの粒子間での相互作用が問題になる[1)]．個別的な例としては，π^0 中間子（中性中間子）はスピン 0 をもち，2 個の光子に崩壊することがわかっている．このことから π^0 の**固有パリティ** *intrinsic parity* を電磁場の固有パリティに相対的にきめることができて，その結果は $\omega=-1$ に対応することになる；ただしこの結論にはこの崩壊過程を通じて全系のパリティが保存されることが仮定されている．つまり，中性中間子は奇性の固有パリティをもつ，あるいは**ギスカラー** *pseudoscalar* 粒子であるといわれる．この種の粒子は $\omega=+1$ をもつスピン 0 の粒子（もしその種の粒子が存在するとすれば）とはっきり区別される．後者は**スカラー** *scalar* 粒子とよばれるべきものである．同じく 0 のスピンをもつ $\pi^\pm$ 中間子（荷電中間子）の固有パリティを，電磁場に対して相対的に求めることはできない．というのは荷電中間子の光子への崩壊は荷電の保存によって阻止されることになるからである．しかし，荷電中間子は核子（陽子および中性子）の相互作用を通じて生成・消滅することができる．その結果，パリティの保存をこの相互作用を通じても仮定するならば，核子に対する $\pi^\pm$ の固有パリティを求めることができる．慣用上の規約としては，核子に対して偶性のパリティが，$\pi^\pm$ に対しては奇性のパリティが割り当てられている．

29-4 反転状態と演算子

ある反転された状態の運動方程式は§26の冒頭のあるずらされた状態に対する運動方程式と同様なやり方で求めることができる．(26.5) との類推から予想されるように，ある特定のケットが Schrödinger 方程式に従っているとすれば，そのケットを反転した状態もやはり同じ方程式に従うことが証明されている．ただし，$[U_I, H]=0$ の条件があるとする．この条件の成立する場合には，H と U_I とは同時に対角化することができ，したがってエネルギー固有状態を，はっきり定義されたパリティをもつように選ぶことができる．さらに，もしも $|\alpha\rangle$ と $U_I|\alpha\rangle$ とか一次独立であれば，この場合エネル

1) C. N. Yang and J. Tiomno, *Phys. Rev.* **79**, 495 (1950) ; G. C. Wick, A. S. Wightman and E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **88**, 101 (1952) ; K. Nishijima, "Fundamental Particles" (Benjamin, New York, 1964) p. 41.

ギーの縮退が存在しているはずである．

(26.6) についての議論から類推して，ある力学変数 Ω の反転状態に関する行列要素は，元の状態に対する $U_I^\dagger \Omega U_I$ の対応する行列要素に等しくなる．U_I はユニタリーと定義されているから，(29.3) の第一式に左から $U_I^\dagger$ をかけてやれば次のようになる．

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \omega U_I^\dagger \psi_\alpha(-\mathbf{r}) \qquad \text{または} \qquad U_I^\dagger \psi_\alpha(\mathbf{r}) = \omega^{-1}\psi_\alpha(-\mathbf{r})$$

次に $U_I^\dagger \mathbf{r} U_I$ を評価するには，これをある任意の状態 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ に作用させてみればよい．

$$U_I^\dagger \mathbf{r} U_I \psi_\alpha(\mathbf{r}) = U_I^\dagger \mathbf{r}\omega\psi_\alpha(-\mathbf{r}) = \omega^{-1}\omega(-\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r})$$

したがって

$$U_I^\dagger \mathbf{r} U_I = -\mathbf{r} \tag{29.4}$$

運動量 $\mathbf{p}$ および角運動量 $\mathbf{L}$ に対しては，$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$，$\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$ であるから同様なやり方で次の関係が容易に証明される．

$$U_I^\dagger \mathbf{p} U_I = -\mathbf{p} \qquad U_I^\dagger \mathbf{L} U_I = \mathbf{L} \tag{29.5}$$

U_I は空間座標に作用するがスピンには影響しないから，それは $\mathbf{S}$ とは可換，したがってまた $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ とも可換であると予想される．したがって

$$U_I^\dagger \mathbf{S} U_I = \mathbf{S} \qquad U_I^\dagger \mathbf{J} U_I = \mathbf{J} \tag{29.6}$$

(29.4) から (29.6) までの方程式は，古典論的に座標，運動量，角運動量にふくまれる空間の反転性から当然予想されるほかの結果と一致している．座標および運動量は**ベクトル** *vector* あるいは**極性ベクトル** *polar vector* とよばれているものの例であり，角運動量は**軸性ベクトル** *axial vector* 或いは**ギベクトル** *pseudo vector* の一つである．

29-5 時 間 反 転[1]

ケット $|\alpha\rangle$ または波動関数 ψ_α によって表わされる状態は時間反転によって，時間経過の向きを逆向きにとって発展するケット $|\alpha'\rangle$ または波動関数 $\psi_{\alpha'}$ に変換される．この新しい状態に対しては，並進運動量および角運動量の符号はすべて反転させられているが，他の量は不変である．時間反転は次のような時間を含まない演算子 T によって実現されることになる．

$$T|\alpha\rangle = |\alpha'\rangle \qquad \text{あるいは} \qquad T\psi_\alpha = \psi_{\alpha'}$$

---

1) 時間反転が量子力学に導入されたのは E. P. Wigner, *Göttinger Nachr*. **31**, 546 (1932) による．なお；E. P. Wigner, "Group Theory" (Academic, New York, 1959)〔邦訳「群論と量子力学」(吉岡書店，1971)〕の第26章参照．

以下の議論では T は閉じた孤立系に対する一つの対称的な演算であると仮定することにする；現在の時点ではあらゆる実験的証拠はこの仮定と矛盾しない．このことは次のことを意味する．すなわち，もしも $|k\rangle$ あるいは u_k がハミルトニアンのエネルギー固有値 E_k をもつ一つの固有状態（時間について一定）をあらわすとすれば，$T|k\rangle$ あるいは Tu_k もまた同じ固有値をもつ一つの固有状態をあらわしている．

ある特定の時刻たとえば $t=0$ では，この波動関数 ψ_α は（23.22）に従ってエネルギー固有関数 u_k を使って展開することができる：

$$\psi_\alpha = \mathrm{S}_k a_{\alpha k} u_k \tag{29.8}$$

ここで ψ_α に対して実行することのできる2組の操作を考える．ただし，これらの操作の組はいづれの場合も同一の物理的状態に導くことが予想されるものとする．すなわち，第一の場合では，状態をそのまま時刻 t まで発展させておき，そこで状態を反転させる．第二の場合では，$t=0$ で状態を反転させておいてから，その逆になった状態をそのまま逆向きの時間経過をたどって t まで，つまり $-t$ まで発展させる．第一の組の操作についていえば，時刻 t までの発展によって波動関数（29.8）は次の形をとることになる．

$$\mathrm{S}_k a_{\alpha k} e^{-iE_k t/\hbar} u_k$$

ここで T は線型演算子であると一応仮定しておくことにしよう（すぐ次に示されるようにこの仮定は矛盾に導く）．そうすれば t での時間反転の結果は次のようになる．

$$\mathrm{S}_k a_{\alpha k} e^{-iE_k t/\hbar} T u_k \tag{29.9}$$

第二組の操作については，$t=0$ での時間反転によって波動関数は次の形をとる．

$$\mathrm{S}_k a_{\alpha k} T u_k$$

Tu_k のエネルギー固有値は E_k であるから，時刻 $-t$ までの発展の結果は

$$\mathrm{S}_k a_{\alpha k} e^{iE_k t/\hbar} T u_k \tag{29.10}$$

となる．波動関数（29.9）と（29.10）とは，もしもそれらが同一の物理的状態をあらわしているはずであるならば，お互いにある定数倍になっていなければならないが，一般にはそうならないことは明らかである．つまり T は線型演算子ではありえない．

29-6 反線型演算子

今述べた矛盾は何らかの形で複素共役化の操作に関連していることは明らかである．こ

のことは次のことを考えれば驚くべきことではない．つまり ψ_α に対する Schrödinger 方程式で t の符号を変えることは，H が実の量で時間を含まない限り，ψ_α に対する方程式を $\psi_\alpha{}^*$ に対する方程式に変えることになるからである．したがって，Tが性質

$$T(a_1\psi_1+a_2\psi_2)=a_1T\psi_1+a_2T\psi_2$$

をもつ線型演算子であると仮定する代りに，Tは

$$T(a_1\psi_1+a_2\psi_2)=a_1{}^*T\psi_1+a_2{}^*T\psi_2 \tag{29.11}$$

という性質をもつとの仮定を試めしてみる．このような演算子は**反線型** *antilinear* であるといわれる．Tに対する仮定（29.11）を使えば，（29.9）と（29.10）の二つの状態はいずれも

$$S_k a^*_{\alpha k} e^{iE_k t/\hbar} T u_k$$

となり，矛盾は解消する．

Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t}=H\psi_\alpha$$

の両辺に T を作用させると，その結果は次のようになる．

$$-i\hbar\frac{\partial(T\psi_\alpha)}{\partial t}=TH\psi_\alpha$$

つまり，もしも T が H と可換，したがって

$$[T,H]=0 \tag{29.12}$$

とすれば，$T\psi_\alpha$ は当然予想される通りに，t を $-t$ でおき代えた Schrödinger 方程式を満たすことになる．さらに（29.12）からの結論として，先に仮定したように Tu_k は固有値 E_k をもつ一つのエネルギー固有関数になっている．要するに，T がある対称性の操作であるという条件は（29.12）の方程式が満たされるとすることに他ならない．その意味でここに生じた事情は，すでに議論ずみのたとえば（26.5）に関連してユニタリー対称性の操作について生じた事情と少しも変ったものではないのである．

29-7　反ユニタリー演算子

反線型演算子は一つの線型演算子と複素共役演算子Kとの積としてあらわすことができる．ただしKは任意の関数 ψ に対して

$$K\psi=\psi^*$$

によって定義されており，$K^2=1$ である．反線型演算子のつくる類として特によく用いられるのは，Kにかかる線型演算子がユニタリーになっているような反線型演算子から構成されているものである：この種の演算子は**反ユニタリー** ***antiunitary*** とよばれている．明らかにK自身は反線型であり同時に反ユニタリーである．また2個の状態の内積は，双方の状態が同時に同一の反ユニタリー演算子の作用をうける場合その複素共役量にかわるということは容易に証明される(問題15を見よ)．同じ議論を使えば，一つの状態のノルムは，実数であるため変化しないことも証明される．状態のノルムおよび一対の状態の内積の絶対値が時間反転によって不変であるということは当然予想されるべきことである．その意味で，Tは反ユニタリーであると仮定してそれを次の形に書くことにする．

$$T=UK \tag{29.13}$$

ただし U はユニタリーである．

§20で考えた光学模型ポテンシャルを使う場合のようにHが複素数になっているとすれば，(29.12) の条件からUが H^* を H に変換することが要求される；すなわち $UH^*U^\dagger=H$．一般には，このような性質をもつユニタリー演算子は存在しない．したがって，複素ハミルトニアンであらわされるような物理系は時間反転に対して不変になっていない．[1] このことは予想されるべきことなのである．なぜならば，(20.1) で示されているように，ある複素ポテンシャルによる粒子の吸収は時間経過の特定の向きを指定することになるからである．ここでの状況は大雑ぱにいって古典粒子の運動における摩擦ないしは古典流体力学における粘性と類似なものになっている．つまりこれらの場合には速度の符号の変化に応じてその符号を変化する，したがって時間反転に対する不変性を破っている力が導入されているわけである．量子力学における複素ポテンシャルと古典力学における摩擦または粘性は，いずれも本来はるかに複雑な状況の簡単な現象論的記述を与えているものであるが，そのこと自身は決してより要素的なレベルでの時間反転の不変性の欠除を意味することにならない．

29-8　スピンが零の粒子に対するT

ここでは，時間の反転状態に対して，すべての運動量および角運動量の符号は逆になる

---

1)　この結論にもかかわらず，(20.16) の相反性の定理はこの事情のもとでも成立することに注意すること．

が他の量は不変であるようなTに対する具体的な表現を求めてみる．最も簡単なのは，状態が一成分の波動関数であらわされるスピンが零の粒子の場合である．あるψ_αに座標$\mathbf{r}$を作用させると新しい状態が生じる．この状態をψ_βとよぶことにすると$\mathbf{r}\psi_\alpha=\psi_\beta$．もしも時間反転に際して$\mathbf{r}$の符号は変化しないものとすると，この関係は時間を反転した状態に対してもやはり成立しているものと予想される；すなわち$\psi_{\alpha'}=T\psi_\alpha$，$\psi_{\beta'}=T\psi_\beta$とすれば，$\mathbf{r}\psi_{\alpha'}=\psi_{\beta'}$．この二つの関係から次のことが導かれる．

$$\mathbf{r}T\psi_\alpha=\mathbf{r}\psi_{\alpha'}=\psi_{\beta'}=T\psi_\beta=T\mathbf{r}\psi_\alpha$$

ψ_αは任意の状態であるから，結局次の関係が得られる．

$$\mathbf{r}T=T\mathbf{r} \tag{29.14}$$

ψ_αに運動量$\mathbf{p}$を作用させて生じる新しい状態をψ_γとよぶことにすれば$\mathbf{p}\psi_\alpha=\psi_\gamma$．ここでも時間反転に際して$\mathbf{r}$の符号は変化しないものとすれば，時間を反転した状態に対しては$\mathbf{p}\psi_{\alpha'}=-\psi_{\gamma'}$となっているものと予想される．そうだとすれば，次の関係が得られる．

$$\mathbf{p}T\psi_\alpha=\mathbf{p}\psi_{\alpha'}=-\psi_{\gamma'}=-T\psi_\gamma=-T\mathbf{p}\psi_\alpha$$

したがって

$$\mathbf{p}T=-T\mathbf{p} \tag{29.15}$$

$\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$であるから同様な論法で，

$$\mathbf{L}T=-T\mathbf{L} \tag{29.16}$$

座標表示をとれば，$\mathbf{r}$は実の演算子，$\mathbf{p}=-i\hbar\nabla$は純虚数の演算子になる．この場合，(29.14)から(29.16)までの方程式を満たすTに対する最も簡単な選び方は

$$U=1 \qquad T=K \tag{29.17}$$

である．明らかにこの結論は表示の選び方に依存している．たとえばψ_αが$\mathbf{r}$の関数ではなくて$\mathbf{p}$の関数になる運動量表示をとることにすれば，その場合の$\mathbf{p}$は実の乗数演算子になり，$\mathbf{r}$はたとえば$x=i\hbar(\partial/\partial p_x)$のような純虚数になる．(29.13)の方程式はこの場合にもやはり正しいが，Uは今度は$\mathbf{p}$を$-\mathbf{p}$に変える演算子になる．すなわち$U\psi_\alpha(\mathbf{p})=\psi_\alpha(-\mathbf{p})$．座標表示は最もなじみがあり，また便利でもあるので，今後は常に座標表示を使って議論することにしよう．

29-9 スピンが零でない粒子に対するT

スピンをもつ粒子に対しては，(29.16)との類推から次の関係が予想される．

$$\mathbf{S}T=-T\mathbf{S} \quad \text{および} \quad \mathbf{J}T=-T\mathbf{J} \tag{29.18}$$

Tの具体的な形が表示の選び方に依存する以上，座標表示を選ぶという先の選択に加えて，$s\neq 0$ の場合の$\mathbf{S}$行列のある特定の組を選ばなければならない．すでに証明しておいたように（問題7を見よ），$s=1$ のスピン行列（27.11）と $j=1$ の行列（27.26）とはあるユニタリー変換でだけ異なっている．つまり，それらは異なった表示の選び方に対応している．そこでスピンを扱う際には，話を確定させるため常に（27.26）で指定される表示で議論することにする．

そのような表示の選び方の結果として，$\mathbf{r}, S_x, S_z$ は実の演算子，$\mathbf{p}, \mathbf{L}, S_y$ は純虚数の演算子になる．したがってもしもTがKに等しいとすれば，（29.14）から（29.16）までの方程式と（29.18）の S_y の方程式とは満たされることにはなっても，S_x と S_z の方程式は満たされないことになる．したがって，Uとしては $\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{L}$ および S_y と可換で，かつ

$$S_xU=-US_x \quad \text{および} \quad S_zU=-US_z \tag{29.19}$$

となるように選んでおかなければならない．要するに，U は S_y のみの関数で，かつ（29.19）を満たす任意のユニタリー演算子であればよいことになる．

（27.16）からわかっているように，ユニタリー演算子 $\exp(-i\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}/\hbar)$ はある状態をベクトルとしての角 $\boldsymbol{\phi}$ だけ回転する．さらに（28.15）によれば，それはある演算子を角 $\boldsymbol{\phi}$ だけ回転させた同一の演算子に変換する．同様な考え方で，ユニタリー演算子 $\exp(-i\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{S}/\hbar)$ は任意の$\mathbf{S}$の演算子関数を，その引数が$\mathbf{S}$を$\boldsymbol{\phi}$だけ回転させた結果になっているだけで同一の演算子関数に変換することになる．特に $e^{-i\pi S_y/\hbar}$ は$\mathbf{S}$をy軸の周りに π ラジアンだけ回転する，したがって S_x を $-S_x$ に，S_z を $-S_z$ に変換するユニタリー変換になっている．したがって，

$$T=e^{-i\pi S_y/\hbar}K \tag{29.20}$$

とおけばよいことになる．このTが希望の性質をもつことは問題16で具体的に証明されている．スピン½の粒子に対しては（29.20）は次のような特に簡単な形をとる[1]．

$$T=-i\sigma_yK \quad \text{ただし} \quad \sigma_y=\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \tag{29.21}$$

1）σ_y は（27.30）で定義された三つの Pauli のスピン行列の一つである．これについては§41でより詳しい議論がされている．

29-10 数個の粒子を含む系

数個の粒子が存在する場合の T は，各々の粒子に対応する U 演算子をかけ合わせた上で，さらにこの積と K とをかけてつくることができる：すなわち

$$T=e^{-i\pi S_{1y}/\hbar}\cdots e^{-i\pi S_{ny}/\hbar}K \tag{29.22}$$

指数関数の積中の因子の順序は，各因子がそれに対応する粒子の状態にのみ作用する以上重要ではない；つまり各因子はすべて互いに可換であり，その結果Tは全体として各Sに対する (29.18) の第一式を満たしている．

それぞれの S_y は純虚数であるから，(29.22) 中の指数関数因子はいずれも実の量になり，したがって K とは可換である．さらに $K^2=1$ であることから T^2 に対する次の関係がわかる．

$$T^2=e^{-2i\pi S_{1y}/\hbar}\cdots e^{-2i\pi S_{ny}/\hbar}$$

これらの指数項のそれぞれは 2π ラジアンだけの回転になっている．§27 での議論によれば，2π の回転は整数スピンの粒子に対しては $+1$ に，半奇数スピンの粒子に対しては -1 に等しい．したがって T^2 は，この系中の半整数スピン粒子の総数が偶数か奇数かによって，$+1$ か -1 かに等しい．

(29.12) の下のところで注意しておいたように，u_k を一つのエネルギー固有関数とすれば，Tu_k もまた同一の固有値をもつ一つのエネルギー固有関数になる．まず最初に縮退は存在しないものと考えておく．そうすれば Tu_k は u_k と同一の状態を表わしているわけで，したがって c をある数として $Tu_k=cu_k$ となり，さらに

$$T^2u_k=Tcu_k=c^*Tu_k=|c|^2u_k$$

もしも $T^2=+1$ であれば，$|c|^2=1$ となるが，これは確かに一つの可能な状況になっている．しかしもしも $T^2=-1$ とすれば，それに対応する数 c は存在しない．このことは何らかの縮退が存在することを意味している．この場合には，u_k と Tu_k とは直交することになる．このことは次のようなやり方で証明することができる．問題15で証明されているように，$(T\psi_1, T\psi_2)=(\psi_2, \psi_1)$．ここで $\psi_1=Tu_k$, $\psi_2=u_k$ と選ぶことにすると，この関係は $(T^2u_k, Tu_k)=(u_k, Tu_k)$ となる．$T^2=-1$ であるから，左辺は右辺を負にしたものになり，したがって両辺は共に零，ゆえに Tu_k は u_k と直交するわけである．結局，すべての u_k のそれぞれに対して u_k と縮退しているが，それとは区別される Tu_k が存在する．その結果，全体としての縮退は偶数次になる．

対称度の低い結晶では，それぞれの原子を取りまく状況は非対称的になっている；したがってこの種の原子内の電子の状態に対して何らかの縮退を期待することは普通の場合にはできそうもないものと考えられる．これらの電子はその結晶の残りの部分によってつくられる静電場内を運動している．原子の i 番目の電子の座標を $\mathbf{r}_i$ とすると，この静電場は，方程式（24.29）の場合のように，ハミルトニアン中の $\sum_i e\phi(\mathbf{r}_i)$ という項によって表わされる．このような項は明らかに，その原子を記述するハミルトニアンの残りの部分の時間反転に対する対称性をこわさない．したがってもしも原子当りの電子の個数が奇数であるとすれば，$T^2=-1$ となり，少なくとも二重の縮退が存在しなければならないことになる；この結果は **Kramers 縮退** *Kramers degeneracy*[1] とよばれている．結晶がある外部磁場 $\mathbf{H}$ 内におかれた場合，この縮退は除かれる．後で示すように（§48），それぞれの電子の軌道運動およびスピンに伴う磁気的効果は，ハミルトニアン中にあらわれる $\mathbf{L}\cdot\mathbf{H}$ および $\mathbf{S}\cdot\mathbf{H}$ に比例する相互作用項を生じることになる．方程式（29.16）および（29.18）からわかるように，この場合ハミルトニアンはもはや時間反転について対称でない．つまり，結晶の原子当りの電子の個数が奇数の場合，磁場はエネルギー準位の分割を生じるわけである．注意すべきことは，Tを閉じた孤立物理系に対する対称性の演算子とするという，（29.7）のすぐ後で述べた仮定と以上の事情とは矛盾するものでないということである．というのは，外部磁場というのは，その定義によって考えている系の外部から課せられたものであるからである；つまり，この磁場 $\mathbf{H}$ をつくり出している電流は $\mathbf{T}$ によって逆行されないということが暗に仮定されていたために，縮退が除かれることになるのである．

29-11 固有関数の実数性

スピンが零ないしはスピンが重要な意味をもたない一つの系を考えよう．この場合座標表示をとれば $U=\mathbf{1}$ かつ $T=K$．さらに K と可換で，非縮退固有値 ω_μ をもつ一つの演算子 Ω が存在するものと想定しよう．$\Omega v_\mu=\omega_\mu v_\mu$．この場合，$Kv_\mu$ は v_μ と同一の状態をあらわしており，したがって c をある数として $Kv_\mu=v_\mu{}^*=cv_\mu$．ここで v_μ を実数部分と虚数部分の和として $v_\mu=w_\mu+iz_\mu$（ただし，w_μ と z_μ は実関数）と書くことにすれば，

1) H. A. Kramers, *Koninkl. Ned. Akad. Wetenschap., Proc.* **33**, 959 (1930)

$$w_\mu - iz_\mu = c(w_\mu + iz_\mu) \qquad \text{または} \qquad (1-c)w_\mu = i(1+c)z_\mu$$

この結果は w_μ と z_μ は互いに他の倍数になっていること，したがって v_μ はある複素因子がかかる可能性を除けば実の量であることを意味する．特別の場合として，系が時間反転について対称であるならば，すべての非縮退エネルギー固有関数はこの意味で実数であることになる．

以上の議論は，縮退が存在する場合にも拡張できることがある．ある任意の球対称ポテンシャルを含む実のハミルトニアンはこのような場合の興味ある一例になっている．この種のハミルトニアン H については

$$[H, \mathbf{L}^2] = 0 \qquad [K, H] = 0 \qquad [K, \mathbf{L}^2] = 0$$

固有関数 v_{klm} はエネルギー固有値 E_k および軌道角運動量量子数 l で指定されてもまだ磁気量子数 m に関して縮退している．しかしながら m に付随している演算子 $L_z = -i\hbar(\partial/\partial\phi)$ は純虚の量で，(29.16) にしたがって K とは交換しない．したがって，前のパラグラフでしたような，$Kv_{klm} = cv_{klm}$ ゆえに v_{klm} は実という議論はできない；実際に，この v_{klm} は球関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ に比例しており，Y_{lm} は $m \neq 0$ に対して複素数になるため，一般には実数にならない．

しかしながら，$m=0$ の場合に話を限ることとするならば，固有値零をもつ L_z の固有関数だけを問題にしているわけである．この場合，$L_zK = -KL_z$ という関係から L_z の一つの固有関数に K をかけたものもやはり固有値零をもつ L_z の固有関数になっていることが導かれる．したがって，もしもそれ以上の縮退が附け加わらなければ，$m=0$ をもつ H および $\mathbf{L}^2$ の固有関数 v_{kl0} は上に述べた意味で実数になる．§19 および§20 の散乱理論で用いられた固有関数はこの種のものに他ならない．予想通りに，位相のずれ δ_l は，ハミルトニアンが時間反転について対称か対称でないかに応じて，実数か複素数になっている．[1]

30□力学的対称性

§26 で説明しておいたように，対称性と縮退とは互いに結びついている．たとえば，

---

1) スピンが効いている系への §§29-11 の方法の拡張については，R. G. Sachs, "Nuclear Theory" (Addison-Wesley, Reading, Mass. 1953) の付録 3 を見よ．

空間的変位に対する対称性をもつ系は通常運動量ベクトル $\mathbf{p}$ の方向に関して縮退している．ただし，$\mathbf{p}=0$ の場合には例外が生じる．同様に，回転に対する対称性をもつ系は通常角運動量ベクトル $\mathbf{J}$ の方向について，いいかえれば $\mathbf{J}$ のある特定の成分たとえば J_z の固有値に関して縮退している．このときもやはり $\mathbf{J}=0$ の場合は例外的になる．空間反転および時間反転という離散的な対称性の場合には，縮退は先の場合のように見やすくはない．というのは，この場合の変換された状態は，元の状態と同一であることの方が起こりやすいからである．

第IV章で指摘しておいたように，水素原子（§16）および等方的調和振動子（問題12）は回転に対する対称性に附属した縮退以上の附加的縮退をもっている．その際に注意したように，この結果は波動方程式が一つ以上のやり方で，つまり異なった座標系によるとか，単一の座標系でもその向きをいろいろなふうにとるとかして解くことができる場合には常に予想されるべきことなのである．この章の立場からもう一度見直せば，この種の縮退も何らかの対称性に結びついていることが予想される．ただしこの場合の対称性はこの章のこれまでのところで考えてきた幾何学的なタイプのものでないことは明らかである．この種の対称性を**力学的** *dynamical* 対称性とよぶことにする．というのは，力の法則のもつ特異な形式からこれらの対称性が生じているからである．この節で考察される二つの比較的簡単な場合では，力学的対称性の存在と一般的性質は，幾何学的対称性についての議論と極めてよく似たやり方で，対応する古典系から推定することが可能である．ただし，このことは一般には可能ではない；実際，物理的に興味のある状況で古典的な対応をもたないものが少なくないのである．

30-1　古典的 Kepler 問題

Kepler 問題に対する古典論的ハミルトニアンは相対座標を使って次のものになる．

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}-\frac{\kappa}{r} \tag{30.1}$$

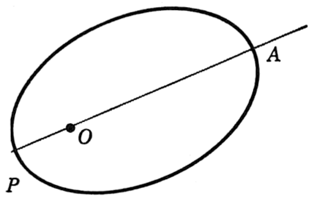
ただし，μ は換算質量で κ はある正の定数である．水素原子に対しては，§16 と比較すればわかるように，$\kappa=Ze^2$ である．近日点 P（第25図）から遠日点 A までの距離の半分にあたる半長軸 a と $(a^2-b^2)^{\frac{1}{2}}/a$（ただし b は半短軸）に等しい離心率 e をもつ楕円は古典的軌道問題の一つの特定の解になっている．

H は時間を含まないから，全エネルギー E は一つの運動の定数になっている．

さらに，Hは回転についての対称性をもっているから，軌道角運動量 $\mathbf{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ も一つの運動の定数になっている．これらの結果はいずれも(24.22)を使って確認することができるが，ただしその際いくつか Poisson 括弧の計算が必要になる．また次の結果を証明することも困難でない．

$$E=-\frac{\kappa}{2a} \qquad \text{および} \qquad L^2=\mu\kappa a(1-e^2) \tag{30.2}$$

$\mathbf{L}$は明らかに軌道面に垂直な一つの極性ベクトルである．



第25図　古典的ケプラー軌道，引力の中心は楕円の焦点Oにある．

Hの回転対称性は軌道がOをよぎるある平面内に存在するようにさせるには十分ではあるが，その軌道を閉じることを要求するにはHの回転対称性だけでは十分でない．ポテンシャルエネルギーが $V(r)=-(\kappa/r)$ というニュートンの形から僅かにずれると，そのために楕円の長軸 PA がゆっくり歳差運動をおこすことになり，その結果軌道は閉じなくなる．このことは，Hと$\mathbf{L}$以外に何か運動の恒量になっている量があって，軌道面内での長軸の方向を規定するのにそれを利用することができることを暗示している．この意味で，OからPまたはOからAへの方向をもち，長軸に平行になっていると予想される一定ベクトル$\mathbf{M}$を探すことにする．

このようなベクトルはずっと以前から知られており，**Lenz ベクトル** *Lenz vector* または **Runge-Lenz ベクトル** *Runge-Lenz vector*[1] とよばれている．それは次のような形に書ける．

$$\mathbf{M}=\frac{\mathbf{p}\times\mathbf{L}}{\mu}-\frac{\kappa}{r}\mathbf{r} \tag{30.3}$$

このベクトルが運動の定数になっていること，大きさ κe をもつこと，OからPへの方

1) C. Runge, "Vektoranalysis," vol. 1, p. 70 (S. Hirzel, Leipzig 1910); W. Lenz, *Z. Physik.* 24, 197 (1924).

向をもつことは容易に証明される．なお，次の関係は軌道のパラメーター a および e の選び方には無関係である．

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{M}=0 \qquad \mathbf{M}^2=\frac{2H}{\mu}\mathbf{L}^2+\kappa^2 \tag{30.4}$$

30-2　水素原子

水素原子を取り扱うためには，上の古典論の諸量を量子力学に翻訳しなければならない．$\mathbf{r}, \mathbf{p}$ および $\mathbf{L}$ に対してはこのことはすでに済んでいる．$\mathbf{M}$ に対しては注意がいる．つまり $\mathbf{p}\times\mathbf{L}$ は演算子としては $-\mathbf{L}\times\mathbf{p}$ に等しくならないため，(30.3) はそのままではエルミチアンな量を定義していないからである．そこで $\mathbf{M}$ を次のような対称的な平均として定義し直すことにする．

$$\mathbf{M}=\frac{1}{2\mu}(\mathbf{p}\times\mathbf{L}-\mathbf{L}\times\mathbf{p})-\frac{\kappa}{r}\mathbf{r} \tag{30.5}$$

そうすれば，$\mathbf{r}$ および $\mathbf{p}$ に対する交換関係を使って，かなりの量の計算をしたあげく次の関係を証明することができる．

$$\begin{aligned}&[\mathbf{M}, H]=0 \qquad \mathbf{L}\cdot\mathbf{M}=\mathbf{M}\cdot\mathbf{L}=0\\&\mathbf{M}^2=\frac{2H}{\mu}(\mathbf{L}^2+\hbar^2)+\kappa^2\end{aligned} \tag{30.6}$$

これらの関係は先のベクトル $\mathbf{M}$ の定数性および (30.4) の量子力学的な対応になっている．

(30.5) および (30.6) の方程式は水素原子のエネルギー準位を求めるためにかつて Pauli[1] によって用いられたものである．この Pauli の仕事は，§16 で論じられた波動方程式の基礎に関する Schrödinger の仕事[2] と独立にかつ同時に行なわれたものである．Pauli の取り扱い方は，$\mathbf{M}$ の三つの成分をある無限小変換の生成元とみなすことと同等なもので，その点 $\mathbf{L}$ の三成分を三つの座標軸の周りの無限小回転生成元と見なした §27 のやり方と殆ど同じものになっている．その意味で，ここでも 15個の交換関係から構成されている 6 個の生成元 $\mathbf{L}, \mathbf{M}$ の代数を調べてゆくやり方で話を進めよう．15個の中の 3 個の交換関係は (27.14) ですでに与えられており，次のもののサイクリックな順列になる．

1) W. Pauli, *Z. Physik* **36**, 336 (1926).
2) E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.* **79**, 361 (1926).

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \tag{30.7}$$

次の交換関係のサイクリックな順列としてもう9個が与えられる.

$$[M_x, L_x]=0 \qquad [M_x, L_y]=i\hbar M_z \qquad [M_x, L_z]=-i\hbar M_y \tag{30.8}$$

最後の3個の交換関係の計算は，はるかに面倒になるが，結果は次のもののサイクリックな順列になる.

$$[M_x, M_y]=-\frac{2i\hbar}{\mu}HL_z \tag{30.9}$$

Lはそれだけで閉じた代数（30.7）を構成しており，§27で示しておいたように群 $O(3)$ を生成する．しかしながら **L** と **M** を一緒にしたものは閉じた代数を形成しない．というのは，たとえ（30.8）は **L** と **M** だけを含んでいるにしても，（30.9）のために H がやはりもち込まれてくるからである．しかし，Hは時間に無関係で **L** および **M** と可換なのであるから，ハミルトニアン H のある特定のエネルギー固有値 E に対応するヒルベルト空間のある部分空間に議論を限ることができる．そうすれば，（30.9）で H を E で置き換えてもよいわけである．ただしこの E は束縛状態に対しては負の量になる．ここで **M** を次の **M′** で置き換えるのが便利である.

$$\mathbf{M}' \equiv \left(-\frac{\mu}{2E}\right)^{\frac{1}{2}}\mathbf{M} \tag{30.10}$$

（30.8）の交換関係は **M′** に対しても同様に成立し，（30.9）は次の形に置き換えられることになる.

$$[M_x', M_y']=i\hbar L_z \tag{30.11}$$

30-3 群 $O(4)$

6個の生成元 **L**, **M′** は一つの閉じた代数を構成するが，この代数はある既知の代数と同一であることは次のようにして示すことができる．座標ベクトル $\mathbf{r}=(x, y, z)$ および運動量ベクトル $\mathbf{p}=(p_x, p_y, p_z)$ を次のように標示し直す：

$$\mathbf{r}=(r_1, r_2, r_3) \qquad \text{および} \qquad \mathbf{p}=(p_1, p_2, p_3)$$

さらに角運動量ベクトル $\mathbf{L}=(L_x, L_y, L_z)$ も次のようなふうに標示し直す.

$$\mathbf{L}=(L_{23}, L_{31}, L_{12})$$

つまり，$i, j=1, 2, 3$ として,

$$L_{ij}=r_i p_j - r_j p_i \qquad [r_i, p_j]=i\hbar\delta_{ij} \tag{30.12}$$

となるわけである．ここで

$$M_{x'}=L_{14} \qquad M_{y'}=L_{24} \qquad M_{z'}=L_{34} \tag{30.13}$$

第 4 番目の座標および運動量の成分 r_4 と p_4 を新たに設けることによって，(30.12) を i, $j=1,2,3,4$ にまで拡張してみる．(30.12) と (30.13) とから (30.7)，(30.8) および (30.11) の交換関係が導かれることは容易に証明される．

6 個の生成元 L_{ij} は 3 個の生成元 $\mathbf{L}$ の 3 次元から 4 次元への拡張になっていることは明らかである．L_{ij} の生成する群が 4 次元での固有回転群あるいは直交群になることは証明することができる．その意味で，この群は $O(4)$ と書かれており，+1 に等しい行列式をもつ，すべての 4×4 の実規格直交行列の集合である．明らかにこの群は水素原子の幾何学的対称性をあらわしているものではない．なぜならば，第四成分 r_4 および p_4 はあくまで仮想的なもので力学変数と同一視することはできないからである．$O(4)$ が水素原子の力学的対称性を記述するといわれるのはこの理由によるものである．もちろん，幾何学的対称性を記述する $O(3)$ は，この $O(4)$ に一つの部分群として含まれている．

$O(4)$ の生成元を求める際に考察の対象が束縛状態に限られていたということは注意すべき重要な点である．連続固有値をもつ状態に対しては，E は正になり，$\mathbf{M}'$ がエルミチアンであるためには (30.10) の平方根の中の符号を変えておかなければならない．そうすれば (30.11) の右辺の符号も変わり，(30.12) および (30.13) のとり方はもはや正しくなくなるわけである．要するに，この例での力学的対称性の群が同型になっているのは，四次元の空間座標についての回転の群ではなくて，むしろ 1 次元の時間座標と 3 次元の空間座標についてのローレンツ変換の群なのである[1]．

30-4 水素のエネルギー準位

ここまでくれば，実際上これ以上は苦労なしに，エネルギー固有値を求めることができる．まず次の二つの量を定義する．

$$\mathbf{I}=\tfrac{1}{2}(\mathbf{L}+\mathbf{M}') \qquad \mathbf{K}=\tfrac{1}{2}(\mathbf{L}-\mathbf{M}') \tag{30.14}$$

これらが次の交換関係を満たすことは容易にわかる．

1) V. Fock, *Z. Physik* **98**, 145 (1935) ; V. Bargmann, *Z. Physik* **99** 576 (1936) ; M. Bander and C. Itzykson, *Rev. Mod. Phys.* **38**, 330, 346 (1966).

$$[I_x, I_y]=i\hbar I_z \text{ 等々} \qquad [K_x, K_y]=i\hbar K_z \text{ 等々}$$
$$[\mathbf{I}, \mathbf{K}]=0 \qquad [\mathbf{I}, H]=[\mathbf{K}, H]=0 \tag{30.15}$$

つまり，$\mathbf{I}$ および $\mathbf{K}$ はそれぞれに $O(3)$ 代数または $SU(2)$ 代数を構成している．さらに，可能な固有値が次のものになることも容易にわかる．

$$\mathbf{I}^2=i(i+1)\hbar^2 \qquad \mathbf{K}^2=k(k+1)\hbar^2 \qquad i, k=0, \tfrac{1}{2}, 1, \ldots \tag{30.16}$$

変換関係（30.15）を使って容易に示されるように，$O(4)$ 群の階数は 2 になっている．したがって 2 個の Casimir 演算子が存在し，それらを次のように選んでおいてよいことは明らかである．

$$\mathbf{I}^2=\tfrac{1}{4}(\mathbf{L}+\mathbf{M}')^2 \qquad \text{および} \qquad \mathbf{K}^2=\tfrac{1}{4}(\mathbf{L}-\mathbf{M}')^2$$

別のやり方として，$\mathbf{I}^2$ と $\mathbf{K}^2$ の和および差を選ぶことにしてもよい．すなわち

$$C=\mathbf{I}^2+\mathbf{K}^2=\tfrac{1}{2}(\mathbf{L}^2+\mathbf{M}'^2) \qquad \text{および} \qquad C'=\mathbf{I}^2-\mathbf{K}^2=\mathbf{L}\cdot\mathbf{M}' \tag{30.17}$$

（30.6）の第二式からわかるように，$C'=0$．したがってここで問題にしているのは $O(4)$ の中の $\mathbf{I}^2=\mathbf{K}^2$ が成り立っている部分だけである．結局 $i=k$ で，（30.17）の第一の Casimir 演算子の可能な値としては

$$C=2k(k+1)\hbar^2 \qquad k=0, \tfrac{1}{2}, 1, \ldots \tag{30.18}$$

となる．ところで，（30.6）の第三式からは，（30.10）および（30.17）と考え合わせると次の関係が得られる．

$$C=\frac{1}{2}\left(\mathbf{L}^2-\frac{\mu}{2E}\mathbf{M}^2\right)=-\frac{\mu\kappa^2}{4E}-\tfrac{1}{2}\hbar^2$$

C に対する表式（30.18）を使うと，次式を得る．

$$E=-\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2(2k+1)^2} \tag{30.19}$$

$\kappa=Ze^2$ であることを思い出し，かつ数列 1. 2. 3. . . が n の値になるような n の自然なとり方として $n=2k+1$ とおけば，（30.19）は（16.15）の波動方程式からの結果と一致している．

（30.16）で i および k に対して半一奇数値を用いることに対して何等障害になる事情がないということは注意すべき重要な点である．唯一の物理的な制限として，$\mathbf{L}^2=l(l+1)\hbar^2$ が l の整数値だけをもつということがある．しかし，（30.14）から $\mathbf{L}=\mathbf{I}+\mathbf{K}$ である以上，§28 の三角形の規則からわかるように，l は $i+k=2k=n-1$ から整数の階差で減少していって $|i-k|=0$ にいたるまでの任意の値をもつことができる．

つまり l は整数値に限られているだけでなく，全量子数 n に対して許される正しい範囲の値をもつことになっている．さらにこのエネルギー準位の縮退もまた正しく与えられている．というのは，I_z と K_z はそれぞれ $2k+1=n$ 個の独立な値をとることができ，したがっていずれにせよ n^2 個の可能な状態が存在することになるからである．

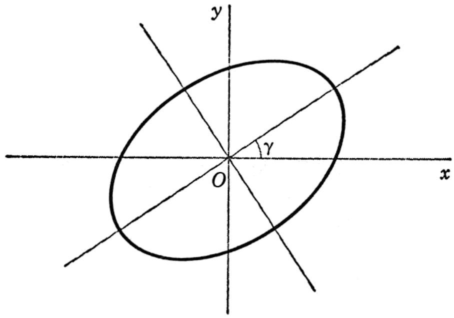
最後に，(29.5) に関連して議論しておいたように，$\mathbf{L}$ は一つの軸性ベクトルであり，空間反転に際して符号を変えないことを注意しておく．同様な考え方で，(30.5) で定義された $\mathbf{M}$ は一つの極性ベクトルで，これは符号を変える．したがって，対称性の生成元 $\mathbf{L}$ および $\mathbf{M}$ で定義された状態は，はっきり定義されたパリティをもつ必要がないことが予想される．このことは実際にその通りになっている．というのは偶数および奇数の l をもつ状態は水素原子では縮退しているのである．

30-5　古典的等方振動子

三次元での等方的調和振動子は次のハミルトニアンによって記述される．

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+\tfrac{1}{2}K\mathbf{r}^2 \tag{30.20}$$

これは§13 で論じられた線型調和振動子を力の定数がすべての方向について同じになっている場合に拡張したものになっている．半長軸 a と半短軸 b をもち，長軸の方向が x 軸とある角 γ をなしているような一つの楕円は，この古典的軌道問題の一つの特解になっている（第26図）．Kepler 問題のときと同様に，H および $\mathbf{L}$ は運動の定数になっており，次式で与えられる値をもつ．



第26図　古典的調和振動子の軌道．引力の中心は楕円の中心 O にある．

$$E=\frac{1}{2}K(a^2+b^2) \qquad \text{および} \qquad \mathbf{L}^2=mKa^2b^2$$

軌道がこの場合にもやはり閉じているという事実は，長軸の向きの角γを規定するのに用いることのできる運動の定数が何か他に存在することを示唆している．しかしながら，第25図と第26図の間には一つの著しい相違点が存在する． Kepler 問題においては，引力の中心は楕円の焦点にあるのに対し，一方の振動問題ではそれは中心にある．つまり，Kepler 問題の軌道においては，長軸に沿った二つの方向 OA と OP とは同等でなく，またその短軸もまた対称性の一要素にはなっていない．これに反して，振動問題の軌道においては長軸に沿った二つの方向および短軸に沿った二つの方向は，同等に良い対称性の要素になっている．このことから，この場合の附加的な運動の定数は Kepler 問題のときのような一つのベクトルではなくて，むしろ一つの四重極テンソルになることが予想される．

この四重極テンソルの成分は，(27.44) の後の五つの式にあるように定義することにする．次に Poisson 括弧を適当にとって計算してみればわかるように，これらのQは，α および β が $\alpha/\beta=m\cdot K$ であるように選ばれている場合かつその場合に限って定数になる． 26図に示されているような軌道に対しては，これらの Q は次の値をもつ．

$$Q_{xy}=\frac{1}{2}\alpha(a^2-b^2)\sin 2\gamma \qquad Q_{yz}=Q_{zx}=0$$

$$Q_0=\frac{\alpha}{2\sqrt{3}}(a^2+b^2) \qquad Q_1=\frac{1}{2}\alpha(a^2-b^2)\cos 2\gamma$$

26図から予想されるように，γ を $\gamma+\pi$ で置き換えた場合，またさらにaとbとを入れかえかつγを $\gamma\pm\frac{1}{2}\pi$ で置き換えた場合のいずれの場合にもこの四重極テンソルの成分は不変になる．

30-6 量子的等方振動子

この場合の量子論的問題は直交座標を使って変数分離できるので，その解は§13で与えられている解を使って容易に求めることができる．エネルギー準位は次のものになる．

$$E_n=(n+\tfrac{3}{2})\hbar\left(\frac{K}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad n=n_x+n_y+n_z$$

$$n_x, n_y, n_z=0, 1, 2, \ldots \tag{30.21}$$

E_n の縮退は $\frac{1}{2}(n+1)(n-2)$ になることは容易に示される．この状態のパリティは，n

が偶数かあるいは奇数かに応じて偶あるいは奇になる．したがって l の値として可能なのは $n, n-2 \ldots$ と下って1または0にいたるものだけに限られることになる．また，これらの l はそれぞれちょうど1回あらわれることも証明することができる．

§27の議論と比較してみればわかるように，この場合の対称性の群は $SU(3)$ になっている．[1] $\alpha/\beta = mK$ となることが要求されているので，(27.47) の Casimir の演算子は (30.20) のハミルトニアンの二乗と次のような関係にあることになる．

$$C = -3 + \frac{4m}{3\hbar^2 K} H^2 \tag{30.22}$$

H の n 番目の固有値の表式 (30.21) を (30.22) に代入すると次のようになる．

$$C = \tfrac{4}{3}(n^2 + 3n)$$

$SU(3)$ は階数2をもつから，二つの Casimir 演算子が存在し，それらは 0, 1, 2,... の値をとる二つのパラメーターを使ってあらわされる．これらのパラメーターを使った (27.47) の第一の Casimir 演算子の一般式は次のようになる．[2]

$$C = \tfrac{4}{3}(\lambda^2 + \lambda\mu + \mu^2 + 3\lambda + 3\mu)$$

つまり，$SU(3)$ の表現の中で $(\lambda, \mu) = (n, 0)$ をもつものだけが等方的振動子によって実現されている．この種の事情は，$O(4)$ の表現の中で $i = k$ をもつものだけが実現されていた水素原子の場合といささか似ている．

水素原子の場合と対照的な点は，すでに説明しておいたように，等方的振動子においてはパリティの混合状態は存在しないという点である．その理由はそれぞれの縮退状態での l の値がすべて偶数であるか，すべて奇数であるかのいずれかであるためである．このことはまた，8個の生成元のすべて，すなわち $\mathbf{L}$ の三成分と5個の Q とが空間反転に際して符号を変えない以上予想されるべきことでもある．

なお，§25で定義された上昇および下降の演算子，$a^\dagger$ および a を使っても，等方的振動子と $SU(3)$ との間に関連をつけることができる．この種の演算子は三つの座標のそれぞれに附随して一対あるので，今の場合それぞれの座標の一対を合わせて三対あることになる．そして，(25.11) のハミルトニアンは，次のようになる．

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \qquad \text{および} \qquad H = \left(\sum_{i=1}^{3} a_i^\dagger a_i + \frac{3}{2}\right)\hbar^2\omega_c$$

---

1) J. M. Jauch and E. L. Hill, *Phys. Rev.* **57**, 641 (1940).

2) Lipkin, 上掲書, p. 216. ただし彼の C の定義はここで用いられているものと因子4だけ異なっている．

ただし，$i, j=x, y, z$. この場合，9個の演算子 $a_i^\dagger a_j$ の代数は $U(3)$ の生成元の代数になっている；つまり，これらの演算子の一次結合が，Hと $SU(3)$ の8個の生成元になることを証明することがきるのである[1].

問　　題

1. $U_r(\boldsymbol{\rho})$ に対する (26.4) の形と，**r** および **p** の成分に対する交換関係を利用して，(26.6) が成り立つことを証明せよ．
2. 回転の下では任意の二つのベクトルのスカラー積が不変であることを利用し，それによって回転行列Rの行および列がそれぞれお互いに正規直交になっていることを証明せよ．なお，Rの転置行列がRの逆行列に等しいこと，またRの行列式が ±1 に等しいことも証明せよ．
3. (27.7) の **L** の形と **r** および **p** の成分に対する交換関係を利用して，(27.14) の三つの交換関係が成り立つことを証明せよ．
4. (27.11) で定義されている三つの行列 **S** が $\mathbf{S}\times\mathbf{S}=i\hbar\mathbf{S}$ という関係を満たしていることを証明せよ．なお，$\mathbf{S}^2=2\hbar^2$ であることも証明せよ．
5. 無限小ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ だけ回転させられた状態に対する **r** の行列要素は，もとの状態に対する $\mathbf{r}_R=\mathbf{r}+\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r}$ の対応する行列要素に等しいことを証明せよ．
6. 無限小ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ だけ回転させられた状態に対する **J** の行列要素は，もとの状態に対する $\mathbf{J}_R=\mathbf{J}+\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{J}$ の対応する行列要素に等しいことを証明せよ．
7. (27.11) で与えられた S_z の固有値は，(27.26) で与えられている $j=1$ に対する J_z の固有値と同一であることを証明せよ．次に S_z を J_zに変換する最も一般的なユニタリー行列U (つまり $US_zU^\dagger=J_z$) を求めよ．この U が同時に S_x を J_x にかつ S_y を J_y に変換するようにこの U 中の任意のパラメータを選べ．この U は (27.8) のベクトル波動関数 $\boldsymbol{\psi}_\alpha$ をどのように変換するか．
8. (27.27) の定義と §14 で与えられた球面調和関数の定義を用いて (27.28) を確認せよ．
9. **J** が (27.16) の $j=\frac{1}{2}$ の式によって与えられているとき，$U_R(\boldsymbol{\phi})=\exp(-i\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}/\hbar)$ の 2×2 行列の形での具体的表式を求めよ．ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ は，大きさ ϕ で方位角としては (θ, φ) をもつとする．先に求めた $U_R(\boldsymbol{\phi})$ の行列がユニタリーで，かつ $\phi=2\pi$ のときそれは -4 に等しいことを具体的に示せ．
10. (27.37) および (27.40) で定義された行列 λ_j $(j=1, \cdots 8)$ が交換関係 (27.41) および (27.42) を満たすことを証明せよ．次に，これらの交換関係 (λ_j のもとの行列表示ではなく) を用いて，それぞれの λ_j が (27.43) で定義された Casimir 演算子Cと可換であることを示せ．
11. (27.44) の8個の演算子の28個の交換関係を **r** と **p** の成分間の交換関係から算出し，その結果が (27.45) および (27.46) のとり方を採用した場合の λ_j の交換関係と一致することを証明

---

1) より詳しい議論については次のものを見よ．J. P. Elliot, *Proc. Roy. Soc.* (*London*) **A245**, 128 (1958)；Lipkin 前掲書，第4章

せよ．

12. §28の方法と公式を利用して，$j_1=\frac{3}{2}$, $j_2=\frac{1}{2}$ の場合の Clebsch-Gordan 係数の行列を計算し，その結果は一覧カードと比較せよ．

13. 重陽子はスピン1をもつ．Wigner-Eckart の定理を用いて，重陽子の三種類の状態：$m=1, 0, -1$ に対する電気的四重極能率の演算子 $Q(2,0)$ の期待値の比を求めよ．

14. (29.17) にならって定義され，$U\psi_\alpha(\mathbf{p})=\psi_\alpha(-\mathbf{p})$ という性質をもつ，運動量反転の演算子 U はユニタリーであることを証明せよ．

15. もしも $\psi_{\alpha'}=T\psi_\alpha$ でかつ $\psi_{\beta'}=T\psi_\beta$ であれば，$(\psi_{\alpha'}, \psi_{\beta'})=(\psi_\alpha, \psi_\beta)^*=(\psi_\beta, \psi_\alpha)$ となることを示し，このことからある状態ベクトルのノルムが時間反転によって不変であることを証明せよ．

16. $U=e^{-i\pi S_y/\hbar}$ が (29.16) の二つの方程式を満たすことを具体的に示せ．その際 S_y と演算子 $S_\pm=S_z\pm iS_x$ との交換関係を利用すること．

17. $s=\frac{1}{2}$ の場合 $e^{-i\pi S_y/\hbar}=-i\sigma_y$ となることを直接展開によって証明せよ．

18. $T=UK$ という一般形および2個の逐次時間反転がある状態を自分自身にもどすこと．したがって T^2 が単位行列のある倍数であるという事実を利用する一般的議論によって $T^2=\pm1$ であることを証明せよ．その際 (29.20) で与えられている T に対する特定の形式を利用しないこと．

19. スピン演算子 $\mathbf{S}$ をもつ荷電粒子が，ある電気的四重極能率演算子 $\mu\mathbf{S}$ (ただし μ は定数値をとる) を保有するものと仮定する．したがって，任意の電場 $\mathbf{E}$ 内でのこの粒子に対するハミルトニアンは相互作用項 $-\mu\mathbf{S}\cdot\mathbf{E}$ を含むことになる．この粒子がある球対称の静電ポテンシャル $\phi(r)$ 内を運動するとき，たとえ何らの外部電場が存在しない場合でも，空間反転も時間反転もこの粒子に対しては対称的な操作にならないことを証明せよ．

20. §30の議論から出発して座標表示での水素原子の最低エネルギー固有関数を求めよ．線型振動子の最低状態に対する (25.8) 式に対応する方程式を求めることから進んで，次にこの方程式 (25.14) との類推を使って解いてみること．

第VIII章　束縛状態に対する近似法

量子力学においても古典力学と同様，物理的に興味があって，しかもその運動方程式が正確に解けるというような系は比較的少数である．したがって，近似法が理論を実際に応用する殆どすべての場合に重要な役割を演じることが予想される．このことのために，正確な解を見出し得る問題の重要さは減るどころかむしろ増す．というのは，第IV章および第V章の始めに指摘しておいたように，正確な解は近似計算の出発点としてしばしば有用だからである．その上，正確な解は種々の近似法に対する妥当性の限界を確かめるときの助けにもなりうるのである．

この章と次の章で，いくつかの近似方法を展開し，そして典型的ないくつかの問題へそれらを適用しよう．その際問題が束縛状態（本章で考察される）を扱っているか，散乱状態（次章で考察される）を扱っているかに応じて，二つのグループに近似法を分けるのが便利である．

31□定常的な摂動論

定常的な摂動論[1]というのは，小さな攪乱が加えられたときのある系の離散的なエネルギー準位と固有関数の変化を求めることに関係した理論である．この理論ではそもそもの出発点で，Schrödinger の波動方程式にあらわれるハミルトニアンが次のような二つの部分の和に書けるものと仮定されている．すなわち一方の部分 H_0 は，十分簡単な構造をしていて，それの Schrödinger 方程式を解くことができ，他の部分 H' は H_0 に加えられた**摂動** *perturbation* と見なしうる程度に小さいものとする．便宜上，前から用いてきた記号 u_k, E_k を**無摂動の** *unperturbed* ハミルトニアン H_0 についての，既知と想定されている規格直交固有関数と固有値のために使い，ψ と W を摂動の加わったときの定常的な波動関数とエネルギー準位に使うことにする：すなわち

1) E. Schrödinger, *Ann. Physik* **80**, 437 (1926).

$$H\psi=W\psi \qquad H=H_0+H' \qquad H_0u_k=E_ku_k \tag{31.1}$$

31-1　縮退のない場合

H' が小さいという仮定によれば，摂動系の固有関数と固有値を H' の冪級数に展開することが考えられる．このことを実行するのに一番便利なのは，パラメーター λ を使って λ の 0 次，1 次……の冪がそれぞれ 0 次，1 次……の摂動計算に対応するようにすることである．そこで H' を $\lambda H'$ で置き換えて，ψ, W を λ の冪級数としてあらわす．これら 2 つの級数は 0 と 1 の間の λ に対しての連続解析関数になっていると仮定しておく．ただし，この仮定が成り立っていない場合であっても，得られた結果が漸近級数として役に立つ場合が少なくない．要するに，各次数の摂動近似は λ のその次数の冪の係数で与えられる．最後の結果で λ を 1 に等しいとおくことになる．

摂動系の波動関数とエネルギー準位を

$$\begin{aligned}\psi&=\psi_0+\lambda\psi_1+\lambda^2\psi_2+\lambda^3\psi_3+\cdots\\ W&=W_0+\lambda W_1+\lambda^2W_2+\lambda^3W_3+\cdots\end{aligned} \tag{31.2}$$

と書いて，これらを波動方程式に代入すれば次のようになる．

$$\begin{aligned}&(H_0+\lambda H')(\psi_0+\lambda\psi_1+\cdots)\\ &\qquad=(W_0+\lambda W_1+\cdots)(\psi_0+\lambda\psi_1+\cdots)\end{aligned} \tag{31.3}$$

方程式 (31.3) は，λ の連続的にとり得るいろいろな値に対して成立すると考えられるから，両辺における λ の同じ冪の係数を等しいとおいて，次々と高次の摂動を表わす次のような一連の方程式が得られる．

$$\begin{aligned}&(H_0-W_0)\psi_0=0\\ &(H_0-W_0)\psi_1=(W_1-H')\psi_0\\ &(H_0-W_0)\psi_2=(W_1-H')\psi_1+W_2\psi_0\\ &(H_0-W_0)\psi_3=(W_1-H')\psi_2+W_2\psi_1+W_3\psi_0 \quad \text{等々}\end{aligned} \tag{31.4}$$

(31.4) の最初の方程式は，予想されるように，ψ_0 が無摂動系の固有関数のどれか一つになってることを意味している．したがって次のようにおく，

$$\psi_0=u_m, \qquad W_0=E_m \tag{31.5}$$

ある束縛状態の摂動を問題にしている限り，この状態 u_m は離散的である．無摂動系の他の固有関数はエネルギーについて縮退しているか，あるいは連続的に分布していることはありうるとしても，この状態 u_m は縮退していないと仮定する．無摂動系の状態 ψ_0

が縮退している場合は，この節のもっと後で考察する.

(31.4) に関して二つの一般的な注意を付け加えておこう[1]. 第一は，関数 ψ_s のいずれかに対してある任意の ψ_0 の倍数をそれに加えても，方程式の左辺の値は影響をうけることはない，したがってより低次の ψ 関数を使ってのこの ψ_s の決定にも影響を与えないようにすることができるということである.したがってこの任意の倍数を次のようなやり方で選んでおくことにする.

$$(\psi_0, \psi_s)=0 \qquad s>0 \tag{31.6}$$

第二は，ψ_0 と (31.4) のそれぞれの方程式の左辺との，内積が零になることが (23.21) または (23.28) を使えば示され，したがってそれぞれの場合の ψ_0 と右辺との内積も零になり，結局 (31.5) と (31.6) とを使うとそれから次の結果が導かれることになる.

$$W_s=\frac{(\psi_0, H'\psi_{s-1})}{(\psi_0, \psi_0)}=(u_m, H'\psi_{s-1}) \qquad s>0 \tag{31.7}$$

これからわかるように，H' についてある与えられた次数までの W の計算に必要なのは，すぐ次に低い次数の ψ の知識だけでよいのである[2].

31-2 一次の摂動

(31.7) の $s=1$ の方程式からわかるように，

$$W_1=(u_m, H'u_m)=\langle m|H'|m\rangle \tag{31.8}$$

すなわち W_1 は無摂動状態 u_m に対する H' の期待値に他ならない.

ψ_1 の計算には u_n による展開を使うのが便利である.

$$\psi_1=\mathrm{S}a_n^{(1)}u_n \tag{31.9}$$

ここで，S は §23 の初めに定義されているように固有関数の離散的な組についての和と連続的な組についての積分とを一緒にして表わしている. (31.9) を，方程式 (31.4) の第 2 式に代入すれば

$$\mathrm{S}_n a_n^{(1)}(H_0-E_m)u_n=(W_1-H')u_m$$

---

1) P. -O. Löwdin, *J. Math. Phys.*, **6**, 1341 (1965).

2) (31.4) と (31.6) とからはさらに次のことを証明することができる. すなわち，ψ_s までのすべての ψ の知識は，W_{2s+1} までのすべての W を決定するのに十分である. P. -O. Löwdin, *J. Molec. Spectr.* **13**, 326 (1964)；なお問題14. を見よ.

ここで (31.6) によって $a_m^{(1)}=0$, H_0u_n を E_nu_n でおきかえ, u_k^* をかけて全空間にわたって積分し, u の規格直交性を使うと次の結果を得る.

$$a_k^{(1)}=\frac{\langle k|H'|m\rangle}{E_m-E_k} \qquad k\neq m \tag{31.10}$$

31-3 二次の摂動

(31.7) の $s=2$ の方程式を, (31.9) および (31.10) と一緒に考え合わせると, 次の結果が得られる.

$$W_2=\mathop{\mathrm{S}}_n a_n^{(1)}\langle m|H'|n\rangle=\mathop{\mathrm{S}'}_n\frac{\langle m|H'|n\rangle\langle n|H'|m\rangle}{E_m-E_n}$$

$$=\mathop{\mathrm{S}'}_n\frac{|\langle m|H'|n\rangle|^2}{E_m-E_n} \tag{31.11}$$

ここで $\mathop{\mathrm{S}'}_n$ は n についての和および積分から $n=m$ の項を除くことをあらわしている. (31.11) の最後の等式は H' がエルミチアンであるとの仮定から導かれる.

ψ_2 の計算にはやはり u_n による展開を使う：つまり

$$\psi_2=\mathop{\mathrm{S}'}_n a_n^{(2)}u_n \qquad a_m^{(2)}=0 \tag{31.12}$$

とおき, これを (31.4) の第三式に代入すると次の関係式が得られる.

$$\mathop{\mathrm{S}'}_n a_n^{(2)}(H_0-E_m)u_n=\mathop{\mathrm{S}'}_n a_n^{(1)}(W_1-H')u_n+W_2u_m$$

前と同様に, H_0u_n を E_nu_n でおきかえ, u_k^* をかけて積分すると

$$a_k^{(2)}(E_k-E_m)=a_k^{(1)}W_1-\mathop{\mathrm{S}'}_n a_n^{(1)}\langle k|H'|n\rangle \qquad k\neq m$$

これから, (31.8) と (31.10) を使って次の結果を得る.

$$a_k^{(2)}=\mathop{\mathrm{S}'}_n\frac{\langle k|H'|n\rangle\langle n|H'|m\rangle}{(E_m-E_k)(E_m-E_n)}-\frac{\langle k|H'|m\rangle\langle m|H'|m\rangle}{(E_m-E_k)^2} \tag{31.13}$$

(31.2) で $\lambda=1$ とおいたものと, (31.8) から (31.13) までの結果から, H' について2次までのエネルギーおよび波動関数は次式で与えられることになる.

$$W=E_m+\langle m|H'|m\rangle+\mathop{\mathrm{S}'}_n\frac{|\langle m|H'|n\rangle|^2}{E_m-E_n}$$

$$\psi=u_m+\mathop{\mathrm{S}'}_k u_k\left[\frac{\langle k|H'|m\rangle}{E_m-E_k}\left(1-\frac{\langle m|H'|m\rangle}{E_m-E_k}\right)\right.$$
$$\left.+\mathop{\mathrm{S}'}_n\frac{\langle k|H'|n\rangle\langle n|H'|m\rangle}{(E_m-E_k)(E_m-E_n)}\right] \tag{31.14}$$

ここのS'もやはり，それぞれの場合に応じてkおよびnについての和または積分から$k=m$ または $n=m$ の項を除くことをあらわしている．このψは規格化されていないことは注意しておくべき重要な点である．つまりH'について2次では

$$(\psi,\psi)=1+\mathrm{S}_k'\frac{|\langle k|H'|m\rangle|^2}{(E_m-E_k)^2}$$

となっている．このようなことになるのは，(31.6) の形の条件が任意に課されうるからである．(ψ_0,ψ_s) として別の選び方をすれば，(31.14) とはある複素乗数因子だけ異なった ψ の表式が導かれることになるわけである．ただしこれらの異なったψの表式は W に対する表式には影響を与えないことになる．

31-4　振動子の摂動

縮退のない状態への一次および二次の摂動論の簡単な応用例として，§13 および §25 の線形調和振動子に $H'=\frac{1}{2}bx^2$ のエネルギーがつけ加わることによる，m番目のエネルギー準位の摂動を考える．無摂動ハミルトニアンは，$H_0=p^2/2\mu+\frac{1}{2}Kx^2$（質量は量子数 m とまぎれないように μ であらわす）で，(13.13) 式で与えられる無摂動系の固有関数 $u_m(x)$ は固有値 $E_m=(m+\frac{1}{2})\hbar(K/\mu)^{1/2}$ に対応している．ただし，$m=0,1,2,.\cdots\cdots$．この例では，摂動系の固有関数と固有値は，$u_m(x)$ および E_m において単にKを$K+b$で置きかえるだけで得られるはずだから，〔計算の例としては〕明らかにとるに足らぬものであるが，それにもかかわらずこの例は教訓的なのである．

いろいろな組の調和振動子の波動関数ではさんだ x^2 の行列要素が必要になるが，これは第IV章の問題3と同じように，Hermite 多項式の母関数 (13.10) を使うか，あるいはもっと簡単には (22.3) の定義と (13.18) または (25.12) および (25.13) で与えられている $\langle n|x|m\rangle$ の表式を使って行列の掛算によって求めることができ，次の結果が容易に得られる．

$$\langle n|x^2|m\rangle=\begin{cases}(2\alpha^2)^{-1}[(m+1)(m+2)]^{\frac{1}{2}}, & n=m+2\\ (2\alpha^2)^{-1}(2m+1), & n=m\\ (2\alpha^2)^{-1}[m(m-1)]^{\frac{1}{2}}, & n=m-2\\ 0 & \text{他の場合}\end{cases}$$

ただし，$\alpha=(\mu K/\hbar^2)^{1/4}$．これを (31.14) の最初の式に代入すれば，二次までのエネルギーとして

$$W=\left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\left(\frac{K}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}}\left(1+\frac{b}{2K}-\frac{b^2}{8K^2}\right)$$

となり，これは $(m+1/2)\hbar[(K+b)/\mu]^{1/2}$ の展開における b についての二次までの項と一致している．

31-5　縮退のある場合

これまでの議論では，無摂動固有関数の中で初期状態以外の状態は縮退していることがありえても，初期状態 $\psi_0=u_m$ は非縮退状態であると仮定されてきた．ここでは同一の無摂動エネルギーをもつ二つの状態 u_m および u_l があるとする．この場合 $k=l$ とすればたまたま $\langle l|H'|m\rangle=0$ でなければ (31.10) から困難が生じる．そこでまず $\langle l|H'|m\rangle\neq 0$ つまり上に得られた結果が通用しない場合を考える．

初期状態はその無摂動エネルギーだけでは指定されない；つまりこの状態は u_m でも u_l でもあるいはそれらの任意の一次結合であってもよい．摂動 H' はある次数のところでこの縮退を取り除き，その結果有限の λ に対して異なったエネルギーをもつ二つの状態が存在するものとしよう．以前に仮定したように，ψ および W は $\lambda\to 0$ に際して λ の連続解析関数になっている；したがって，この二つの状態のそれぞれは $\lambda=0$ のとき u_m と u_l のきまった一次結合に近づく．初期状態として選んだのがたまたまこれらの二つの一次結合の一つになっている場合には，摂動展開は困難なしに実行することができる．しかしながら，もしも任意の他の一次結合から出発する場合には，$\lambda=0$ である不連続的な変化があるわけで，その結果そこでは (31.2) の展開は成立せず，以上で説明した方法は破綻することになる．u_m と u_l の一次結合で，互いに規格直交する一対は無限個あるが，その中で求める特定の一対は H' に応じてきまってくるはずである．たとえば，H' がある外部電場または磁場によって生じた摂動である場合には，求める一対は存在する外場の種類ばかりでなくその方向によることになる．

この一対の始状態を求めるために，(31.5) の代わりに次のように書いておく．

$$\psi_0=a_m u_m+a_l u_l \qquad W_0=E_m=E_l$$

次にこの ψ_0 を (31.4) の第二式の右辺に代入して，この方程式と u_m および u_l との内積をつぎつぎにとってみると次の関係が得られる．

$$(\langle m|H'|m\rangle - W_1)a_m + \langle m|H'|l\rangle a_l = 0$$
$$\langle l|H'|m\rangle a_m + (\langle l|H'|l\rangle - W_1)a_l = 0 \tag{31.15}$$

この斉次代数方程式は係数の行列式が零になる場合かつその場合に限って，a_m および a_l に対して解くことができる．このようにして，(22.21) に関連して現われたのとちょうど同じタイプの永年方程式が得られる；それはこの場合には W_1 に対する一つの二次方程式になる．この方程式の二つの解は次のものになる．

$$W_1 = \tfrac{1}{2}(\langle m|H'|m\rangle + \langle l|H'|l\rangle) \pm \tfrac{1}{2}[(\langle m|H'|m\rangle - \langle l|H'|l\rangle)^2 + 4|\langle m|H'|l\rangle|^2]^{\frac{1}{2}} \tag{31.16}$$

エルミット行列 H' の対角行列要素は実数であることから，W_1 の二つの値もいずれも実数になる．そしてそれらが等しくなるのは次の場合かつその場合に限られている．

$$\langle m|H'|m\rangle = \langle l|H'|l\rangle \quad \text{かつ} \quad \langle m|H'|l\rangle = 0 \tag{31.17}$$

この場合には，縮退は一次では解けないといわれるわけで，このときの a_m および a_l は明らかに一次の計算からは決めることができないのである．

一方，(31.17) の条件のいずれか一方または両方が満たされていない場合には，(31.16) から計算される W_1 の二つの値は区別されており，今度はそのそれぞれを使って (31.15) から a_m および a_l を計算することができる．このようにすれば，無摂動状態 u_m および u_l の一次結合の中の求める一対が得られる．次に u_k と (31.4) の第二式との内積をとって，(31.9) を使うと次の関係が得られる．

$$a_k^{(1)}(E_k - E_m) = -\langle k|H'|m\rangle a_m - \langle k|H'|l\rangle a_l \tag{31.18}$$

この関係から $k \neq m, l$ に対する $a_k^{(1)}$ が与えられ，さらに $a_m^{(1)} = a_l^{(1)} = 0$ と仮定しておけば，(31.6) の $s=1$ の方程式は満たされている．それから後の計算は，以前に非縮退状態について考えたのと全く同様により高いオーダーのところまで実行してゆくことができる．

31-6 縮退の二次での除去[1]

§§ 31-5 で求められた W_1 の二つの値が同一である場合には，この縮退を除くためには二次のオーダーまで計算を進めなければならない．(31.4) の第三式と u_m および u_l との内積をとると次の関係が得られる．

1) J. H. Van Vleck, *Phys. Rev.* **33**, 467 (1929), 第4節

$$\mathsf{S}'_n \langle m|H'|n\rangle a_n^{(1)} - W_2 a_m = 0 \qquad \mathsf{S}'_n \langle l|H'|n\rangle a_n^{(1)} - W_2 a_l = 0 \qquad (31.19)$$

この場合にもやはり (31.6) に基づいて $a_m^{(1)}=a_l^{(1)}=0$ が仮定されている以上，ここでの S' は n についての和および積分から $n=m$ および $n=l$ の項を両方とも除いてあることをあらわしている．(31.18) の $a_n^{(1)}$ を (31.19) に代入すると，次のような a_m および a_l に対する一対の斉次代数方程式になる：

$$\left(\mathsf{S}'_n \frac{|\langle m|H'|n\rangle|^2}{E_m-E_n} - W_2\right)a_m + \mathsf{S}'_n \frac{\langle m|H'|n\rangle\langle n|H'|l\rangle}{E_m-E_n} a_l = 0$$
$$\mathsf{S}'_n \frac{\langle l|H'|n\rangle\langle n|H'|m\rangle}{E_m-E_n} a_m + \left(\mathsf{S}'_n \frac{|\langle l|H'|n\rangle|^2}{E_m-E_n} - W_2\right)a_l = 0 \qquad (31.20)$$

(31.20) に附随している永年方程式は，W_2 に対して (31.16) と同じ一般形をもつ解を与える．この場合の (31.17) に対応する条件は次のものになる．

$$\mathsf{S}'_n \frac{|\langle m|H'|n\rangle|^2}{E_m-E_n} = \mathsf{S}'_n \frac{|\langle l|H'|n\rangle|^2}{E_m-E_n}$$
$$\text{かつ} \qquad \mathsf{S}'_n \frac{\langle m|H'|n\rangle\langle n|H'|l\rangle}{E_m-E_n} = 0 \qquad (31.21)$$

つまり，これらの方程式の両者がともに満たされていなければ，その縮退は二次のオーダーで除かれるわけである．

(31.20) および (31.21) 中にあらわれている和と (31.15) および (31.17) 中にあらわれている行列要素とが極めて類似しているところから，前者に対してしばしば用いられる**二次のオーダーの行列要素** *second-order matrix elements* というよび方が生じている．与えられた任意のオーダーで縮退が除かられるための必要かつ十分条件は，二つの縮退無摂動状態に対する H' の行列要素が等しくならない〔したがって (31.17) あるいは (31.21) の第一式が成立しない〕か，あるいは H' のこれらの状態間の行列要素が零になっていない〔したがって，(31.17) あるいは (31.21) の第2式が成立しない〕かのいずれかになる．

後者の状況に関する限りでは，一次のオーダーで縮退が除かれるための一つの十分条件は，摂動 H' が縮退している始状態 u_m と u_l とを一次のオーダーで**つなぐものである** *connect* こと，つまり $\langle m|H'|l\rangle$ が零にはなり得ないことである．同様に，摂動が始状態間を二次のオーダーでつないでいること，すなわち $\langle m|H'|n\rangle$ と $\langle l|H'|n\rangle$ が両方とも零になることはないような一つまたはそれ以上の状態 u_n が存在する場合に

は，その縮退は二次のオーダーで除かれることになる．

以上の議論はすべて高次のオーダーでの縮退の除去に対しても，また始状態が二重以上に縮退している場合に対しても拡張しうることを示すのは難しいことではない．

31-7 電子スピンを考慮しない Zeeman 効果

一様な外部磁場によって生じた原子のエネルギー準位の変化は **Zeeman** 効果 *Zeeman effect* とよばれている．ここでは水素原子に対する磁場の強さ H について一次のオーダーの変化を考える．簡単のため，電子スピンに附随している磁気能率と磁場との間の相互作用は無視することにする．ただし実際にはこの効果はここで計算している項と同じオーダーの大きさのものになる．電子スピンの効果は §48 になって含ませられるはずである．

一定磁場 $\mathbf{H}$ を表わすベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ としては，$\mathbf{H}=\nabla\times\mathbf{A}$ であるから，次のものをとることができる．

$$\mathbf{A}=\tfrac{1}{2}\mathbf{H}\times\mathbf{r} \tag{31.22}$$

(31.22) の発散 (div) は零になるため，荷電 $-e$ 換算質量 μ の 1 個の電子に対するハミルトニアン (24.39) にあらわれる $\mathbf{A}$ を含む項は次のようになる．

$$\begin{aligned}-\frac{ie\hbar}{\mu c}\mathbf{A}\cdot\nabla+\frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2&=\frac{e}{2\mu c}(\mathbf{H}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}+\frac{e^2}{8\mu c^2}(\mathbf{H}\times\mathbf{r})\cdot(\mathbf{H}\times\mathbf{r})\\&=\frac{e}{2\mu c}\mathbf{H}\cdot\mathbf{L}+\frac{e^2}{8\mu c^2}\mathrm{H}^2r^2\sin^2\theta\end{aligned} \tag{31.23}$$

ただし，$\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$，$\theta$ は $\mathbf{r}$ と $\mathbf{H}$ との間の角で，e は正の量にとってある．調べたいのは H について一次のオーダーまでに限られているから，

$$H'=\frac{e}{2\mu c}\mathbf{H}\cdot\mathbf{L} \tag{31.24}$$

とおくことができる．

摂動をうけない水素原子のエネルギー固有関数を，固有値 $m\hbar$ をもつ $\mathbf{L}_z$ の固有関数になっているように選ぶのが普通である．ただし m は §14 で導入された磁気量子数である．しかし，この選び方でうまくゆくのは磁場が z 方向にかかっている場合に限られている．というのは，その場合には (31.8) は

$$W_1=\langle m|H'|m\rangle=\frac{e}{2\mu c}\mathrm{H}m\hbar \tag{31.25}$$

となり，与えられた n と l をもつ $(2l+1)$ 個の状態の縮退は一次のオーダーで除かれることになる．他方，もしも磁場がかけられているのが z 方向でないならば，m で標示される状態は縮退摂動の計算に対する適当な出発点にはならない．この場合は，無摂動の始状態は摂動場の方向を考慮に入れて選ばれなければならないという，(31.15) のすぐ上のパラグラフの末尾で述べた注意の具体例の一つになっている．

31-8　水素の一次 Stark 効果

強さ E の一様な外部電場によって生じるエネルギー準位の変化は **Stark 効果** *Stark effect* とよばれている．水素原子の場合に E について一次のオーダーの変化を計算するのは，磁場の場合に比べていくらか複雑になる．それにしてもやはり無摂動の始状態を摂動場の方向を考慮して選んでおくことが望ましい；つまり前と同様，外場の方向に平行に z 軸をとり，L_z の固有状態を使う．ただし今度の場合には，下の (31.26) で与えられている H' が空間反転に関して奇性になっており，そのため H' の期待値は確定したパリティをもつすべての状態に対して零になるという事実からくる複雑さがつけ加わっている．

この場合の摂動 H' は外場内におかれた原子核および電子の余分のエネルギーに他ならないから，容易に示されるように次のものになる．

$$H'=e\mathsf{E}z=e\mathsf{E}r\cos\theta \tag{31.26}$$

ただし極軸および **E** は z 方向になっており，e はこの場合もやはり正の量にとってある．§14 の議論からわかったように，任意の球対称ポテンシャルエネルギーに対する波動関数は，それを球面調和関数で表わした場合，方位量子数 l が偶数か奇数かに応じて偶性又は奇性のパリティをもつ．(31.26)の摂動が反転に関して奇性になっている以上零になることのない H' の唯一の行列要素は逆のパリティをもつ無摂動状態に対するものである．このことからわかるように，非縮退状態，たとえば偶性のパリティをもつ水素の基底状態 $(n=1)$ は一次の Stark 効果を示さない．

水素の最初の励起状態 $(n=2)$ は四重に縮退している；その量子数 (l,m) は (0, 0), (1, 0), (1, 1) および (1, −1) という値をもつ．この場合 H' の零にならない非対角行列要素が存在するのは同一の量子数 m をもつ状態に対してだけであるということは，次に示すように全く一般的に言えることなのである．まず (24.31) から

明らかなように，z は軌道角運動量の z 成分 $L_z = xp_y - yp_x$ と可換，したがって $[L_z, H'] = 0$. L_z を対角型にする表示でのこの方程式の状態 j と k との間の行列要素は $(m_j - m_k)\hbar\langle j|H'|k\rangle = 0$ となる．したがって $m_j = m_k$ でなければ $\langle j|H'|k\rangle = 0$ である．結局，上にあげた四個の縮退無摂動状態間の H' のすべての行列要素16個の中で，（パリティが反対の）最初の二つの状態間の非対角要素以外のものはすべて零になることになる．

31-9 摂動におけるエネルギー準位のずれ

（31.15）を導いた議論を拡張適用してみればわかるように，水素原子の $n=2$ 状態の一次 Stark 効果に対する永年方程式は次のものになる．

$$\begin{vmatrix} -W_1 & \langle 0,0|H'|1,0\rangle & 0 & 0 \\ \langle 1,0|H'|0,0\rangle & -W_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -W_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -W_1 \end{vmatrix} = 0 \tag{31.27}$$

H' の零でない行列要素を具体的に求めると

$$\begin{aligned} \langle 1,0|H'|0,0\rangle = \langle 0,0|H'|1,0\rangle^* &= e\mathsf{E}\int u^*_{210}(\mathbf{r})r\cos\theta u_{200}(\mathbf{r})d^3r \\ &= \frac{e\mathsf{E}}{16a_0{}^4}\int_0^\infty\int_{-1}^1 r^4\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/a_0}w^2dwdr \\ &= -3e\mathsf{E}a_0 \end{aligned}$$

（31.27）の四個の根は $0, 0, 3e\mathsf{E}a_0$ および $-3e\mathsf{E}a_0$ となる．したがって4重の縮退の中の半分は一次のオーダーで除かれるわけである．容易に示されるように，W_1 の最初の二つの値は u_{211} と $u_{2,1,-1}$ の任意の2つの一次独立な一次結合に対応しており，第三および第四の値はそれぞれ $2^{-1/2}(u_{200}-u_{210})$ と $2^{-1/2}(u_{200}+u_{210})$ に対応している．以上の結果は次のことを意味している．すなわち，最初の励起状態にある水素原子はちょうど大きさが $3ea_0$ で三つの異なったふうに向くことのできる一つの永久的な電気的双極子をもっているかのような振舞いを示している．その結果，外場に対して平行な一つの状態と，外場に対して逆平行の一つの状態と，外場の方向の成分が零の二個の状態が生じる．

31-10 電気的永久双極子能率のあらわれ方

以上の議論からの結論として，ある原子が電気的な永久双極子能率（すなわちEに比例

するエネルギー変化）をもちうるのは，その無摂動状態が非縮退であって，しかもはっきり定義されたパリティをもたない場合か，あるいは縮退しているがパリティが逆の成分を含んでいる場合かに限られることになる．他方，どんな原子もある電気的な誘導双極子能率をもちうる．このことは，その双極子能率が $\mathbf{E}$ に比例すること，いいかえれば外部電場内でのその原子のエネルギーが $\mathbf{E}^2$ に比例していることを意味する．(31.11) にしたがえば，このタイプの二次の摂動エネルギーは任意の系に対して期待されるわけである．

§29 の議論からわかるように，もしもユニタリーな空間反転の演算子 U_I が任意の系に対するハミルトニアンと可換であるとするならば，その系のエネルギー固有関数をはっきり定義されたパリティをもつように選ぶことが可能である．主として放射能によるベータ崩壊の原因になっている弱い相互作用は例外として，これまでに知られているすべてのハミルトニアンは U_I と可換になっている．したがって，基底状態にある原子あるいは原子核は，せいぜい弱い相互作用から生じるかも知れない極めて小さな電気的永久双極子能率（$\leq e\times10^{-20}$ cm）をもつにすぎないものと予想される．これまでのところこの種の双極子能率で実験的に見つけられたものはない．

また一方，水素原子の場合と同様に，反対のパリティをもつ無摂動縮退状態によって電気的な永久双極子能率が生じるということも確かにあってもよいことである．しかしながら，このことはある特殊な力学的対称性のために水素原子においてのみ見られることであり（§30を見よ），しかもその場合でも基底状態については見られていないのである．なおこの種の縮退が偶然に生じることはありうることではあるが，そのような場合は統計的な根拠からすれば極めてありそうにないことなのである．もっとも，ある分子では，両方のパリティをもつ一群の回転状態が殆ど縮退に近い状態で存在していることがある．これらのエネルギー準位が，分子の熱運動のエネルギーまたはかけられた電場に伴なうエネルギーのいずれかに比べて狭い間隔の配置をとっている場合には，これらの状態がある電気的な永久双極子能率をつくることが可能である．[1] この場合には双極子の向きはその分子のある形体上の軸と関連している；たとえば塩化水素のような非対称的な分子では，双極子は二個の原子を結ぶ直線の方向が双極子の向きになるわけ

---

1) J. H. Van Vleck, "The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities," (Oxford, New York, 1932) p. 154 (脚注 28)，第48節；邦訳：小谷，神戸訳「物質の電気分極と磁性」吉岡書店，1958.

である.

これまでのところで考えられた系では，電気的双極子能率の向きは，（励起状態にある水素原子の場合のように）かけられている電場の方向とか，（塩化水素の場合のように）分子の形態上の軸の方向とかになっている．素粒子とか原子核の場合には，基底状態は非縮退であり，考えうる唯一の形態上の軸はスピン演算子 $\mathbf{S}$ によって定義されるものであると仮定することは十分理由があることである．そうだとすれば，電気的双極子能率の演算子は $\mathbf{S}$ に平行になっているはずである．このことは次のことを意味する．すなわち，ある定常的で球対称な静電ポテンシャル $\phi(r)$ 内を運動しているこの種の粒子に対しては，そのハミルトニアンは μ を一定の数値をとるとして $\mu\mathbf{S}\cdot\nabla\phi$ という形の項を含むことになる．つまり，このような場合でも事情はやはり，空間反転および時間反転がいずれも対称的な演算でないようになっているのである（第Ⅶ章の問題19を見よ）．そこでこの議論を押し進めてゆけば次のことがわかる．すなわち，たとえある素粒子または原子核が荷電，磁気的双極子能率，電気的四重極能率等をもちえたとしても，空間反転と時間反転のいづれか一方または双方が対称的な演算になっているならば，それは磁気的単極，電気的双極子能率，磁気的四重極能率等をもつことはできないのである．この結論は，許される多重極能率と全角運動量量子数との関係について述べた §28 の末尾の注意を補足するものになっている．

32□変　分　法

密接に関連した問題で正確に解けるものがない場合，そのような系のエネルギー準位の最低値すなわち基底状態のエネルギー準位を近似的に決定するのに，変分法を利用することができる．なお，変数分離のできない Schrödinger 方程式で記述される系では，数値解法は極めて面倒であり，WKB 法（§34）も利用できないが，このような系に対してもやはり変分法は適用することができる．

32-1　エネルギーの期待値

§10 で示されたように，任意の規格化された関数 ψ が，エネルギーの固有関数によって，次のように展開され，

$$\psi=\sum_E A_E u_E, \qquad \text{ただし} \qquad Hu_E=Eu_E, \tag{32.1}$$

かつ u_E が完全規格直交系をつくっているならば，関数 ψ に対する H の期待値は，積分を系の座標の全領域にわたってとるとして

$$\langle H\rangle=\int \psi^* H\psi d\tau=\sum_E E|A_E|^2 \tag{32.2}$$

によって与えられる．便宜上，(32.1)，(32.2) において，エネルギーの固有値はすべて離散的と仮定されている；これは，系を箱の中に閉じ込めれば実現できる (§10)．あるいは和の記号を記号 S で置き換えることもできる (§23)．

(32.2) の右辺の和の中の E を，最低の固有値 E_0 で置き換えれば次のような便利な不等式を導くことができる：

$$\langle H\rangle\geq\sum_E E_0|A_E|^2=E_0\sum_E|A_E|^2 \tag{32.3}$$

規格化された関数 ψ に対しては，§10 で示したように $\sum_E|A_E|^2=1$ だから，(32.3) は次の不等式になる．

$$E_0\leq\int\psi^* H\psi d\tau \tag{32.4}$$

ψ が規格化されていない場合には，(32.4) は書き直されて

$$E_0\leq\frac{\int\psi^* H\psi d\tau}{\int|\psi|^2 d\tau} \tag{32.5}$$

となることは明らかである．

変分の方法[1] というのは，いくつかのパラメーターに関係する**試行関数** *trial function* を使って (32.4) または (32.5) の右辺を計算し，次にエネルギーの期待値が最小になるまでパラメーターを変化させるという手続きをとる．得られる結果は，系の基底状態のエネルギーに対する上限であるが，これは試行関数の形が固有関数の形と似ていれば実際に十分近い値を与えるものと考えられる（問題 5 を見よ）．したがって，試行関数を選ぶにあたっては利用しうる限りの知識や物理的直観を使うことが大切になる．[2]

---

1) この方法は，最初1873年に Rayleigh 卿によって力学系の振動数の計算に使われた．"Theory of Sound," 改訂再版．(Macmillan, London, 1937 ; Dover, New York による複刻版もある．)，の第 1 巻，88節，なお，W. Ritz, *J. Reine Angew. Math.* **135**, 1 (1908) ; Morse-Feshbach（前掲書）第9.4節を見よ．

2) この方法を拡張して最低の固有値のいくつかを一緒に取り扱うようにしたやり方については J. K. L. MacDonald, *Phys. Rev.* **43**, 830 (1933) を見よ．下限については P.-O. Löwdin, *Phys. Rev.* **139**, A357 (1965) によって調べられている．なおこの論文にはそれ以前の研究に対する文献があげてある．

32-2　励起状態への応用

もし試行関数が，あるところより低いエネルギー状態のすべての固有関数と直交するならば，それより高いエネルギー準位の上限を得るためにも変分法を使うことができる．エネルギー準位を増加してゆく数列に並べたとしよう：$E_0, E_1, E_2, \cdots$．すると，もしψが，$i=0,1,\cdots\cdots, n$に対するu_{E_i}と直交するならば，(32.1) からそれに対する展開係数A_{E_i}がすべて零になることが容易にわかる．(32.2) の右辺の和において，各固有値EをE_{n+1}で置き換えて一つの不等式を得るが，その結果，エネルギーの期待値がこの固有値E_{n+1}の上限であることになる．

試行関数$\psi - u_{E_0}\int u^*{}_{E_0}\psi d\tau$は，明らかに$u_{E_0}$と直交するから，もし最低状態の固有関数が厳密な解としてか，あるいは十分良好な変分計算による近似から知られているならば第一の励起状態のエネルギーの上限が計算できる．このようにして，任意の個数の固有関数に直交する試行関数をつくってゆくことは容易にできる．

ときによると，エネルギーの固有関数をいくつかのグループに分けて，一つのグループに属する固有関数は他のグループに属する任意の固有関数と直交するようにできることがある．今，Hと可換なエルミット演算子Fがあったとしよう ($FH-HF=0$)；すると，§22 の定理から，FとHは同時に対角化することができ，かつ同じ固有関数を持つ．さて，異なった固有値に対応するFの固有関数は互いに直交する[1]．だから，与えられた一つの固有値をもつFのいくつかの固有関数だけから作られている試行関数は，Fの異なった固有値に対する他の総ての固有関数と直交し，又Fのこの固有値と結びつけられた最低のエネルギー固有値の上限を与えるだろう．演算子Fの固有関数が，たとえばFが角運動量であるときの対称性とか，あるいはパリティとかいうような簡単な性質のために，たやすく見つけられるときには，以上の結果は，便利である．そのときは，ある特定の角運動量の対応する角との依存関係とか，あるいはある特定のパリティとかを持った試行関数がたやすく書き下せて，この角運動量とかパリティを持った最低のエネルギー準位の上限を与えることになる．

32-3　ヘリウムの基底状態

第一の例として，ヘリウム原子の基底状態のエネルギーの上限を得るために，簡単な試

1)　このことはエネルギー演算子については (10.4) 式で実際に示されている．そこで与えられた証明を一般のエルミット演算子にまで拡張することは容易である．

行関数をとって変分法を利用してみる．ヘリウム原子は，電荷 $+2e$ の核とそれを取りまく2個の電子からできている；(16.1) 式からわかるように，そのハミルトニアンは，（核の運動を無視して）

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1{}^2+\nabla_2{}^2)-2e^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{e^2}{r_{12}} \tag{32.6}$$

となる．ここで $\mathbf{r}_1$ および $\mathbf{r}_2$ は，核を原点にとったときの2個の電子の位置ベクトルで，$r_{12}=|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|$ は二つの電子の間の距離である．

もしも，二つの電子の間の相互作用エネルギー e^2/r_{12} がなければ，Hの基底状態の固有関数は (16.24) 式で与えられている規格化された水素原子型の波動関数の二つの積 $u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{100}(\mathbf{r}_2)$ となるだろう：つまり次式で $Z=2$ としたもので与えられる．

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\frac{Z^3}{\pi a_0{}^3}e^{-(Z/a_0)(r_1+r_2)} \tag{32.7}$$

ただし，ここでは (32.7) を試行関数として使うためにZを変分のパラメーターとみなし，必ずしも2に等しくなくてもよいものとしよう．

第IV章の問題13から，基底状態の水素原子に対する運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの期待値はそれぞれ $e^2/2a_0$ および $-e^2/a_0$ であることが導かれる；それに対応する，水素の波動関数は $(\pi a_0{}^3)^{-1/2}e^{-r/a_0}$ である．関数 (32.7) に対する (32.6) の中の両方の運動エネルギー演算子の期待値は，ラプラシアンによる演算が波動関数の長さのスケールの平方に逆比例する結果を与えることに注意すれば，極めてたやすく得られる；(32.7) のスケールは水素の波動関数に比べて，Zという因子だけ小さくなっているから，運動エネルギー演算子の期待値はそれぞれ $e^2Z^2/2a_0$ となる．同様に，$1/r$ という因子のために核のポテンシャルエネルギー演算子の期待値は，長さのスケールに逆比例することになる；さらにまた，核の電荷からくる2という因子が加わって，結局（ポテンシャルエネルギーの）各期待値は $-2e^2Z/a_0$ となる．

32-4 電子間相互作用のエネルギー

電子間の相互作用のエネルギーの期待値は，

$$\iint\psi^*(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\frac{e^2}{r_{12}}\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2$$
$$=\left(\frac{Z^3}{\pi a_0{}^3}\right)^2e^2\iint\frac{1}{r_{12}}e^{-(2Z/a_0)(r_1+r_2)}d^3r_1d^3r_2 \tag{32.8}$$

となる．この積分の計算は，これを二つの重なり合った球対称な荷電分布相互間の静電エネルギーとみなせば，静電気理論による簡単化を導入することができて，極めて容易に実行できる．

球対称でない波動関数にも使えるもっと一般的な積分の方法は，$1/r_{12}$ を球面調和関数に展開することである．

$$\frac{1}{r_{12}}=\frac{1}{r_1}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l P_l(\cos\theta) \qquad r_1>r_2$$
$$\frac{1}{r_{12}}=\frac{1}{r_2}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l P_l(\cos\theta) \qquad r_1<r_2 \tag{32.9}$$

ここに θ は $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_2$ の間の角であって，ベクトル $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ の極角座標をそれぞれ θ_1, ϕ_1 および θ_2, ϕ_2 とすれば $\cos\theta=\cos\theta_1\cos\theta_2+\sin\theta_1\sin\theta_2\cos(\phi_1-\phi_2)$ である[1]．次に

$$P_l(\cos\theta)=P_l(\cos\theta_1)P_l(\cos\theta_2)+2\sum_{m=1}^{l}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m(\cos\theta_1)P_l^m(\cos\theta_2)\cos m(\phi_1-\phi_2) \tag{32.10}$$

であることが証明される．[2]

(32.9) と (32.10) を (32.8) へ代入して，球面調和関数の直交性を使えば，$\mathbf{r}_1$ の極角座標についての積分の結果として，l と m が零でない項はすべて消えてしまうことになる．(32.8) の右辺の積分は

$$(4\pi)^2\int_0^{\infty}\left(\int_0^{r_1}\frac{1}{r_1}e^{-(2Z/a_0)(r_1+r_2)}r_2^2dr_2+\int_{r_1}^{\infty}\frac{1}{r_2}e^{-(2Z/a_0)(r_1+r_2)}r_2^2dr_2\right)r_1^2dr_1$$

となり，これは計算できて $5\pi^2a_0^5/8Z^5$ となる．こうして電子間の相互作用エネルギーは，$5e^2Z/8a_0$ という期待値を持つことになる．

32-5 パラメーター Z の変分

これまでに得た結果によれば，試行関数 (32.7) に対するハミルトニアン (32.6) の期待値は，結局

$$\langle H\rangle=\frac{e^2Z^2}{a_0}-\frac{4e^2Z}{a_0}+\frac{5e^2Z}{8a_0}=\frac{e^2}{a_0}\left(Z^2-\frac{27}{8}Z\right)$$

---

1) (32.9) 式は Legendre の多項式に対する母関数 (14.10) から直ちにでてくる：$\cos\theta$ の表式は，直交座標における $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_2$ のスカラー積から簡単に得られる．

2) E. T. Whittaker and G. N. Watson, "A Course of Modern Analysis," 4 th ed., (Cambrige, London, 1935). p. 328.

となる．これを Z で微分してわかるように，これは $Z=\frac{27}{16}=1.69$ のとき最少になる．したがって，この試行関数を使って得られるヘリウム原子の基底状態のエネルギーの一番小さな上限は

$$-\left(\frac{27}{16}\right)^2\frac{e^2}{a_0}=-2.85\frac{e^2}{a_0}$$

である．ヘリウム原子から，二つの電子を引き離すのに丁度必要なエネルギーの実験値は $2.904\,e^2/a_0$ で，したがって，ここで得られた上限は約1.9パーセントだけ大きい．ヘリウムの基底状態のエネルギーの最も丁寧な変分計算の結果は，実験と極めてよく一致していて，量子力学の理論の重要な一つの検証となっている．[1)]

水素型の波動関数が $Z=2$ のときより，むしろ $\frac{27}{16}$ のときに最もよいエネルギーの値を与えるという結果は，各電子が核を他の電子から遮って，核の有効荷電を電子荷電の $\frac{5}{16}$ だけ減少させているのだということを示している．

もし，電子間の相互作用の項 e^2/r_{12} を摂動とみなせば一次の摂動エネルギーは $Z=2$ として $\langle H\rangle$ で与えられるが，これは $-2.75e^2/a_0$ となり実験値より5.3パーセント大きい．一般に，一次の摂動計算は最適条件を満たしていない一つの変分計算と同等であることは明白である．

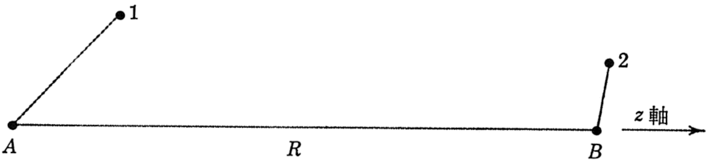
32-6 van der Waals の相互作用

変分法の応用の第二の例として，基底状態にある二つの水素原子の間の，〔遠距離できく〕van der Waals の相互作用を計算しよう．最初摂動論を使ってこの問題を考察しておくのが便利である．というのは，そうすれば（この相互作用の）エネルギーの中，相対距離が大きいところで支配的な項が，距離の6乗に反比例して変わることがよりたやすく見通せるからである．また，摂動論と変分法とは，この項の係数に対して，ちょうど反対側からの限界を与える結果になる．

二つの水素原子の核 A と B が距離 R へだたった位置に固定されているとし，Z 軸を A と B を結ぶ直線に平行にとることにする．$\mathbf{r}_1$ を電子1の核 A からの変位ベクトル，$\mathbf{r}_2$ を電子2の核 B からの変位ベクトルとすれば（第27図を見よ），この二個の

---

1) E. A. Hylleraas, *Z. Physik* **65**, 209 (1930). J. Sucher - H. M. Foley, *Phys. Rev.*, **95**, 966 (1954) には，この計算に対するある種の補正が論じられており，同時に極く最近の研究が参照されている．



第27図　核間のへだたりが R の，二つの水素原子がそれぞれの電子を 1 および 2 を持っている；それらの間の相互作用は (32.11) 式の H' で与えられる.

電子に対するハミルトニアンは次のように書かれる.

$$
\begin{aligned}
&H=H_0+H' \\
&H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1{}^2+\nabla_2{}^2)-\frac{e^2}{r_1}-\frac{e^2}{r_2} \qquad (32.11)\\
&H'=\frac{e^2}{R}+\frac{e^2}{r_{12}}-\frac{e^2}{r_{1B}}-\frac{e^2}{r_{2A}}
\end{aligned}
$$

無摂動系のハミルトニアン H_0 は，基底状態にある相互作用のない二つの水素原子に対する次の解

$$u_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{100}(\mathbf{r}_2)$$

をもつ．ここで，相互作用の H' 項を摂動とみなす；これは $R\gg a_0$ と仮定するのと同じことである.

ここで問題にするのは，Rが大きいときの相互作用のエネルギー中の支配的な項なのであるから，H' を $1/R$ の冪級数に展開して最低次数の項だけを残すことにする.

$$
\begin{aligned}
H'=\frac{e^2}{R}\Bigg\{1+\left[1+\frac{2(z_2-z_1)}{R}+\frac{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2+(z_2-z_1)^2}{R^2}\right]^{-\frac{1}{2}} \\
-\left(1-\frac{2z_1}{R}+\frac{r_1{}^2}{R^2}\right)^{-\frac{1}{2}}-\left(1+\frac{2z_2}{R}+\frac{r_2{}^2}{R^2}\right)^{-\frac{1}{2}}\Bigg\} \\
\approx\frac{e^2}{R^3}(x_1x_2+y_1y_2-2z_1z_2) \qquad (32.12)
\end{aligned}
$$

最後の項は，二つの原子の瞬間的な配置に対応する二つの電気的双極子間の相互作用のエネルギーである[1].

u_0 は $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_2$ の偶関数であり，H' は $\mathbf{r}_1$ および $\mathbf{r}_2$ 各々の奇関数になっているから，状態 $u_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ に対する H' 中の支配的な項の期待値が零であることは，直ちに

1)　(32.12) の展開で省略した $1/R^4$ のように変化する項は，双極子–四極子間の相互作用；$1/R^5$ で変化する項は四重極子–四重極子間の相互作用等である.

わかる．また，省略された H' 中の高次の項は，すべて次数が零以外の球面調和関数で表わされるから，u_0 に対するこれらの項の期待値が，すべて零であることも示される．だから，支配的な相互作用のエネルギーの項は，双極子-双極子間の二次の摂動の項で，それは H'^2 に比例し，したがって $1/R^6$ のように変化する．[1]

32-7 摂動論による計算

二個の水素原子のエネルギーの二次の変化は，添字 n が摂動のない水素原子対の（解離した状態を含めた）すべての状態にわたるとして，（31.11）式から

$$W(R)=S'_n\frac{|\langle 0|H'|n\rangle|^2}{E_0-E_n} \tag{32.13}$$

となる．ただし，S' で表わされた一般化された和において，基底状態 u_0 は除かれている．$E_0<E_n$ で（32.13）の各項の分子は正だから $W(R)$ が負であることは明らかである．したがって，相互作用は引力であり，R が大きいとき $1/R^6$ に比例するという結論になる；この結論は，両方とも縮退のない，球対称な基底状態にある任意の二個の原子に対しても成り立つことを示すことができる．

（32.13）式の各 E_n を，二つの水素原子の $\langle 0|H'|n^*\rangle$ が零でないような最低の励起状態のエネルギー E_{n^*} で置き換えれば，正の量 $-W(R)$ の一つの上限が求められる．つまり，その場合は分母は和の記号の外に出すことができて，この和は行列の掛算として計算できる[2]．すなわち，

$$\begin{aligned}S'_n|\langle 0|H'|n\rangle|^2&=S_n\langle 0|H'|n\rangle\langle n|H'|0\rangle-(\langle 0|H'|0\rangle)^2\\&=\langle 0|H'^2|0\rangle-(\langle 0|H'|0\rangle)^2\end{aligned}$$

$\langle 0|H'|0\rangle=0$ であることはすでにわかっているから，

$$-W(R)\leq\frac{\langle 0|H'^2|0\rangle}{E_{n^*}-E_0} \tag{32.14}$$

状態 n^* では**両方の**原子が主量子数 2 の状態に励起されているから，したがって，$E_0=-2(e^2/2a_0)$，$E_{n^*}=-2(e^2/8a_0)$ で，$E_{n^*}-E_0=3e^2/4a_0$ となる．（32.12）から

$$H'^2=\frac{e^4}{R^6}(x_1^2x_2^2+y_1^2y_2^2+4z_1^2z_2^2+2x_1x_2y_1y_2-\cdots\cdots) \tag{32.15}$$

---

1) F. London, *Z. Physik* **63**, 245 (1930).

2) A. Unsöld, *Z. Physik* **43**, 563 (1927).

を得る．$x_1x_2y_1y_2$ のような入りまじった項は $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ の直交座標成分の一つについての奇関数だから，その期待値はすべて零である．(32.15) の括弧の中の最初の 3 項は，すべて同一の因子の積になっており，その因子は

$$\int x^2|u_{100}(\mathbf{r})|^2d^3r=\tfrac{1}{3}\int r^2|u_{100}(\mathbf{r})|^2d^3r$$
$$=\frac{1}{3\pi a_0{}^3}\int_0^\infty r^2e^{-2r/a_0}\,4\pi r^2dr=a_0{}^2$$

に等しく，したがって $\langle 0|H'^2|0\rangle=6e^4a_0{}^4/R^6$ となる．これを，(32.14) に入れれば

$$W(R)\geq-\frac{8e^2a_0{}^5}{R^6} \tag{32.16}$$

となる．

32-8　変分法による計算

変分法によれば，常に $W(R)$ についての一つの上限を求めることができる．しかしながら，明らかに試行関数 ψ を選ぶにあたっては，ある種の考慮がはらわれねばならない；もし ψ が R に関係していなければ，エネルギーの期待値の R による変わり方は，H' と同様すなわち $1/R^3$ に比例することになるだろう．ここで決定したいのは，$1/R^6$ の相互作用の項の係数なのだから，$1/R^3$ に比例するような上限はこの場合には価値がない．ψ の便利な選び方は，H' に比例する項を含むような選び方になるだろう．というのは，そうすれば期待値の中に H'^2 に比例し，したがって $1/R^6$ のように変化する項が現われるからである．

試行関数として

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{100}(\mathbf{r}_2)(1+AH')$$

を選び，A を変分のパラメーターとする．この ψ は規格化されていないから，(32.4) でなく (32.5) を使って，次式を得る．

$$E_0+W(R)\leq\frac{\iint u_0(1+AH')(H_0+H')u_0(1+AH')d^3r_1d^3r_2}{\iint u_0{}^2(1+AH')^2d^3r_1d^3r_2} \tag{32.17}$$

ここで u_0 は再び基底状態の水素の波動関数の積であり，A は実数と仮定しておく．u_0 は，H_0 の固有値

$$E_0=-e^2/a_0$$

をもつ規格化固有関数で，$\langle 0|H'|0\rangle=\langle 0|H'^3|0\rangle=0$ だから，(32.17) の右辺は

$$\frac{E_0+2A\langle 0|H'^2|0\rangle+A^2\langle 0|H'H_0H'|0\rangle}{1+A^2\langle 0|H'^2|0\rangle} \tag{32.18}$$

と書き換えられる．$\langle 0|H'H_0H'|0\rangle$ は，$\int u_{100}(\mathbf{r})xH_0xu_{100}(\mathbf{r})d^3r$ という形の因子の平方の和であることがたやすくわかるが，これは直接計算すれば零であることが示される．

今問題にしているのは，H'^2 のオーダーの項だけだから，(32.18) の分母を展開すれば次式が得られる．

$$\begin{aligned}(E_0+2A\langle 0|H'^2|0\rangle)&(1+A^2\langle 0|H'^2|0\rangle)^{-1}\\ &\approx E_0+(2A-E_0A^2)\langle 0|H'^2|0\rangle\end{aligned} \tag{32.19}$$

E_0 が負であったことを思い出せば，(32.19) は A の変化に対し，$A=1/E_0$ のとき最小となり，そのときの (32.17) は

$$E_0+W(R)\leq E_0+\frac{\langle 0|H'^2|0\rangle}{E_0}=E_0-\frac{6e^2a_0^5}{R^6} \tag{32.20}$$

となることがわかる．こうして，(32.16) および (32.20) によって相互作用のエネルギーの上限と下限が得られた．つまり，

$$-\frac{8e^2a_0^5}{R^6}\leq W(R)\leq -\frac{6e^2a_0^5}{R^6} \tag{32.21}$$

もっと丁寧な変分計算を行なえば，$W(R)$ の数係数は 6.50 に極めて近いことがわかる．[1)]

33□摂動級数の別の取り扱い

二次のオーダーの摂動エネルギーに対する (31.11) の表式が，一般化された和 S を実行できない場合にも固有値に対する一つの限界を求めるのには利用できることを §32 で示しておいた．ところが，普通にやればいづれも無限の和を含む W_2 および ψ_1 を閉

1) L. Pauling and E. B. Wilson, Jr. (前掲書) 第 47a 節を見よ．(32.21) の結果は厳密には正しくない．なぜならば，(32.12) の H' に含まれているのは，2 個の原子間の静電的双極子–双極子相互作用だけだからである．実際には，その他にこの 2 個の双極子間を電磁気的相互作用が伝播する有限な速度から生じる遅延効果がある．この効果があるために，R が原子遷移の振動数と結びついている電磁波の波長に比べて大きい場合，すなわち $R\gg \hbar ca_0/e^2=137a_0$ の場合には，$W(R)$ は $-1/R^7$ のように減少してゆく．このような大きな距離では，相互作用はとるにたらぬほどに小さくなり，その結果 (32.21) は実際に $W(R)$ についての有効な限界を与えることになる．なお H. B. G. Casimir および D. Polder, *Phys. Rev.* **73**, 360 (1948) を見よ．

じた形の表式で求めることができる場合がいくつかある．この種の場合の具体例として，まず基底状態にある水素原子の二次 Stark の効果の問題を扱い，次にこのような手つづきをより広い種類の問題に一般化してみることにする．

33-1 水素原子の二次の Stark 効果

水素原子の基底状態は縮退していないから，一様な外部電場内での一次のオーダーの摂動エネルギーは零になる．そこで (31.11) 式を計算することが問題になる；

$$W_2 = \mathrm{S}'_n \frac{|\langle 0|H'|n\rangle|^2}{E_0 - E_n} \tag{33.1}$$

座標表示での基底状態のケット $|0\rangle$ は

$$\langle \mathbf{r}|0\rangle = u_{100}(\mathbf{r}) = (\pi a_0{}^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-r/a_0}$$

となり，かつ $E_0 = -e^2/2a_0$ である．問題9では (33.1) と変分法とがそれぞれ W_2 に対する下限および上限を求めるのに利用されている．

ここでは (33.1) を直接扱うかわりに，まず条件 (31.6) の下で (31.4) の第二式を解いて ψ_1 を求め，次に (31.7) を使うことにしよう[1]．(31.26) で与えられている H' を使うと，$W_1=0$ で，(31.4) の第二式は ψ_1 に対する次のような非斉次微分方程式になる；

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} - E_0\right)\psi_1 = -e\mathrm{E}r\cos\theta u_{100} \tag{33.2}$$

まずわかることは，ψ_1 の角変数の含み方は，$\cos\theta$ という引数の倍数としてだけであるということである．このことを証明する一つのやり方は，ψ_1 を r の関数と θ, ϕ についての球関数のかかった項をもつ級数に展開して，それぞれの項が ∇^2 の角部分の一つの固有関数になっていることに注目することである．その場合 (33.2) の左辺は球関数の同じような級数になるが，この級数の各項の中で残って欲しいのは右辺と同じ形で角変数を含む項；すなわち $Y_{10}(\theta,\phi)$ あるいは $\cos\theta$ の項だけということになるわけである．同じことを証明するもう一つのやり方は，(31.9) で与えられる ψ_1 はたまたま零にならない $a_n{}^{(1)}$ をもつ無摂動状態 u_n だけについての和になっている点に注目することである；(31.10) にしたがえば，無摂動状態が球対称である以上このことは u_n が

1) このやり方が最初に公にされたのは次の文献によるものと思われる．小谷正雄 ‘量子力学”（岩波書店，東京，1951 上巻 127頁）

$\cos\theta$ に比例することを意味するわけである．いずれにしても ψ_1 に対する級数の各項は $\cos\theta$ に比例することになり，そのことは結局 ψ_1 自身が $\cos\theta$ に比例することに他ならない．

したがって次のように書くことができる．

$$\psi_1=f(r)\cos\theta \tag{33.3}$$

(31.6) はこのとき自動的に満たされている．(33.3) を (33.2) に代入すれば次のようになる．

$$\frac{d^2f}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{df}{dr}-\frac{2}{r^2}f+\frac{2}{a_0r}f-\frac{1}{a_0{}^2}f=\frac{2\mathsf{E}}{ea_0(\pi a_0{}^3)^{1/2}}re^{-r/a_0} \tag{33.4}$$

(33.4) の解は r についてのある冪級数に e^{-r/a_0} がかかった形をもつことが予想される；さらに，この級数は r の一次またはそれより高次の冪から始まることが予想される．というのは，もしそうでなければ (33.3) は原点で特異性をもつことになるからである．結局はこの級数は二項できれることになり，その結果 (33.4) の解としては次のようになる．

$$f(r)=-(\pi a_0{}^3)^{-\frac{1}{2}}\frac{\mathsf{E}}{e}(a_0r+\tfrac{1}{2}r^2)e^{-r/a_0} \tag{33.5}$$

これが解になっていることは代入して確かめることができる．要するに，E についての一次のオーダーまでで正しい波動関数は次のものになる．

$$(\pi a_0{}^3)^{-\frac{1}{2}}e^{-r/a_0}\left[1-\frac{\mathsf{E}}{e}(a_0r+\tfrac{1}{2}r^2)\cos\theta\right] \tag{33.6}$$

(33.3) と (33.5) とから求められた ψ_1 の表式を (31.7) に代入すれば 2 次のオーダーの摂動エネルギーが与えられて，その結果は次のようになる．

$$\begin{aligned}W_2&=e\mathsf{E}\,(\pi a_0{}^3)^{-\frac{1}{2}}\int r\cos^2\theta f(r)e^{-r/a_0}d^3r\\&=-\frac{4\mathsf{E}^2}{3a_0{}^3}\int_0^\infty(a_0r^4+\tfrac{1}{2}r^5)e^{-2r/a_0}dr\\&=-\frac{9}{4}\mathsf{E}^2a_0{}^3\end{aligned} \tag{33.7}$$

二次の Stark 効果に対するこの表式は，波動方程式を放物線座標を使って変数分離するやり方で最初に求められたものである[1]．

---

1) G. Wentzel, *Z. Physik* **38**, 518 (1926); I. Waller, *Z. Physik* **38**, 635 (1926); P. S. Epstein, *Phys. Rev.* **28**, 695 (1926). 核荷電が Z の場合の 1 次および 2 次の Stark 効果に

33-2 水素原子の分極率

§31 の末尾で注意しておいたように，二次の Stark 効果を誘起された電気的双極子能率を使って解釈することができる．この誘起された能率の大きさはかけられた電場に比例し，方向は同じ方向をもつ．そして，この双極子能率の電場の強さに対する比 α は**分極率** ***polarizability*** とよばれている． 等方的な荷電調和振動子に対してはこれらの条件は正確に成り立っており，この場合のエネルギーの変化は $-\frac{1}{2}\alpha\mathsf{E}^2$ になることは容易に証明される（問題 1）．この種のエネルギー変化が正確には E^2 に比例しない一般の系についても，2 次のオーダーでは

$$W_2=-\tfrac{1}{2}\alpha\mathsf{E}^2 \tag{33.8}$$

ということはやはり正しい．(33.7) と (33.8) との比較からわかるように，基底状態にある水素原子に対しては分極率は次式で与えられることになる（問題12 を見よ).

$$\alpha=\tfrac{9}{2}\,a_0{}^3 \tag{33.9}$$

33-3 Dalgarno-Lewis の方法

以上の手つづきは，次のようなやり方でそれを一般化することができる.[1] これまでに知られているすべての場合での基底状態は非縮退であるから，(31.11) は任意の系の基底状態に適用できる．そこで基底状態に対する (31.11) から出発する．

$$W_2=\mathrm{S}'_n\frac{\langle 0|H'|n\rangle\langle n|H'|0\rangle}{E_0-E_n} \tag{33.10}$$

対して §16 の放物線量子数を 用いたときの 一般表式は $\frac{3}{2}n(n_1-n_2)(e\mathsf{E}a_0/Z)-(\mathsf{E}^2a_0{}^3/16Z^4)n^4[17n^2-3(n_1-n_2)^2-9m^2+19]$ となる．注意すべきことは，厳密にいえばこの系は束縛状態をもたないために，この種の E の冪級数は収斂しえないということである．というのは，一様な電場内におかれた水素原子の電子は $-\mathbf{E}$ の方向に運動してゆくことによって，その結合エネルギーを帳消にするだけのエネルギーを獲得することが可能になるからである．別のいい方をすれば，この電子は核のクーロン場と外部電場によってつくり出されているポテンシャルの障壁を，§17 で議論したような意味で貫通することが可能なのである．水素原子の電場中でのこのような自然解離がおこる率は J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.* **31**, 66 (1928) によって計算されており，その結果は実験室で用いられる程度の強さの電場に対しては極度に小さい．その意味で，E の冪についての振動エネルギーの級数は収斂しないとはいうものの，普通の電場の強さに対しては十分使いものになるのである．

1) A. Dalgarno and J. T. Lewis, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A233**, 70 (1955) ; C. Schwartz, *Ann. Phys.* (N.Y.) **6**, 156 (1959).

いま，基底状態を除くすべての状態nに対して，次の関係を満たすある演算子Fを見つけることができるとしよう．

$$\frac{\langle n|H'|0\rangle}{E_0-E_n}=\langle n|F|0\rangle \tag{33.11}$$

(33.11) を (33.10) に代入すれば次のようになる．

$$W_2=\mathrm{S}'_n\langle 0|H'|n\rangle\langle n|F|0\rangle=\langle 0|H'F|0\rangle-\langle 0|H'|0\rangle\langle 0|F|0\rangle \tag{33.12}$$

ここでは S' を完全な和にするためにまず $n=0$ の項を付け加え，後でそれを引いたわけである．要するに，もしもFを見つけることができるならば，W_2 の評価は大いに簡単化される．というのはその場合計算する必要があるのは，無摂動基底状態の波動関数についての積分だけになるからである．

(33.11) の方程式を次のように書き直してみる．

$$\langle n|H'|0\rangle=(E_0-E_n)\langle n|F|0\rangle=\langle n|[F,H_0]|0\rangle$$

明らかに，もしも F が C を任意の定数として，演算子方程式

$$[F,H_0]=H'+C$$

を満たしているならば，この書き直しは正しい．しかし，この最後の演算子方程式は必要以上に一般的なのである；つまり，Fがこれに比べてはるかに簡単な方程式

$$[F,H_0]|0\rangle=H'|0\rangle+C|0\rangle \tag{33.13}$$

を満たしておれば十分である．というのは，これから $C=-\langle 0|H'|0\rangle$ であることが結論されるからである．

ここで，新しいケット $|1\rangle$ を，F を $|0\rangle$ に作用させた結果として定義する．そうすれば (33.13) は次のように書くことができる．

$$(E_0-H_0)|1\rangle=H'|0\rangle-\langle 0|H'|0\rangle|0\rangle \qquad ただし \qquad |1\rangle\equiv F|0\rangle \tag{33.14}$$

明らかにこのケット $|1\rangle$ には，$|0\rangle$ の任意の倍数を付け加えておくことができる；そこで，この倍数を $\langle 0|1\rangle=0$ になるように選んでおくとする．いまもしも非斉次の微分方程式 (33.14) を $|1\rangle$ について解くことができるとすれば，2次のオーダーの摂動エネルギー (33.12) はこの $|1\rangle$ を使って次のように書くことができることになる．

$$W_2=\langle 0|H'|1\rangle \tag{33.15}$$

同様なやり方で ψ_1 に対する (31.9) の級数を次のような閉じた形に書くことができる：

$$\psi_1 = \mathsf{S}_n' \frac{|n\rangle\langle n|H'|0\rangle}{E_0-E_n} = \mathsf{S}_n'|n\rangle\langle n|F|0\rangle$$
$$= F|0\rangle - |0\rangle\langle 0|F|0\rangle = |1\rangle \qquad (33.16)$$

いかにも当然のことではあるが，(33.15)，(33.16)と（31.7）との間に矛盾のないことは明らかである．

要するに，この Dalgarno-Lewis の方法とは，(31.9) の無限の和の評価を（33.14）の非斉次微分方程式を解くことに置き換えることである．そして，後者の手つづきが，たとえそれが閉じた形で解けない場合であっても，（33.4）の場合のように前者に比べてはるかに簡単であるということは十分ありうることなのである．

33-4 三次の摂動によるエネルギー

ケット $|1\rangle$ は，三次のオーダーでの摂動によるエネルギー W_3 を求めるのに必要とされるすべてになっている．実際，(31.7)，(31.12)，(31.13) と（33.11）の複素共軛式を使うと，W_3 は次のように書き直される．

$$W_3 = (u_0, H'\psi_2)$$
$$= \mathsf{S}_k' \frac{\langle 0|H'|k\rangle}{E_0-E_k}\left(\mathsf{S}_n' \frac{\langle k|H'|n\rangle\langle n|H'|0\rangle}{E_0-E_n} - \frac{\langle k|H'|0\rangle\langle 0|H'|0\rangle}{E_0-E_k}\right)$$
$$= \mathsf{S}_k' \langle 0|F^\dagger|k\rangle(\mathsf{S}_n' \langle k|H'|n\rangle\langle n|F|0\rangle - \langle k|F|0\rangle\langle 0|H'|0\rangle)$$
$$= \langle 0|F^\dagger H'F|0\rangle - \langle 0|F^\dagger|0\rangle\langle 0|H'F|0\rangle - \langle 0|F^\dagger H'|0\rangle\langle 0|F|0\rangle$$
$$- \langle 0|F^\dagger F|0\rangle\langle 0|H'|0\rangle + 2\langle 0|F^\dagger|0\rangle\langle 0|H'|0\rangle\langle 0|F|0\rangle$$
$$= \langle 1|H'|1\rangle - \langle 1|1\rangle\langle 0|H'|0\rangle \qquad (33.17)$$

ただし，最後の等式は $\langle 0|1\rangle = 0$ による．要するに W_2 の場合と同様に W_3 に対しても閉じた形の表式が得られるわけである．[1)]

33-5 水素原子と点荷電との相互作用

この方法の一例として，ここでは一つの点荷電 Ze が一定距離 R におかれている場合の，基底状態にある水素原子のエネルギーの変化を計算してみる．この場合の摂動は，$R>r$ あるいは同じことであるが R が a_0 に比べてはるかに大きいと仮定すれば，次の

1) この結果は，問題14で導かれている公式の一つの特別の場合として，(31.4) および (31.6) から直接求めることもできる．

ものになる.

$$H'=\frac{Ze^2}{R}-\frac{Ze^2}{(R^2+r^2-2Rr\cos\theta)^{1/2}}$$
$$=-\frac{Ze^2}{R}\sum_{l=1}^{\infty}\left(\frac{r}{R}\right)^l P_l(\cos\theta) \tag{33.18}$$

(33.14) 式の構造から予想されることとして, ケット $|1\rangle$ の座標表示を次の形に書くことができるとする.

$$\langle \mathbf{r}|1\rangle=\sum_{l=1}^{\infty} f_l(r)P_l(\cos\theta) \tag{33.19}$$

(33.19) を (33.14) に代入すれば次のような $f_l(r)$ に対する微分方程式が導かれる;

$$\frac{d^2f_l}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{df_l}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}f_l+\frac{2}{a_0r}f_l-\frac{1}{a_0{}^2}f_l=-\frac{2Z}{a_0R^{l+1}(\pi a_0{}^3)^{1/2}}r^le^{-r/a_0} \tag{33.20}$$

予想通りに, この方程式は $l=1$ かつ $\mathsf{E}=-Ze/R^2$ とおけば (33. 4) と一致する.

(33.20) の一つの解は (33.5) からの類推で容易に求められ, やはり二つの項だけを含むものになる. この解を (33.19) に代入すれば $\langle \mathbf{r}|1\rangle$ が得られて

$$\langle \mathbf{r}|1\rangle=\sum_{l=1}^{\infty}\frac{Z}{R^{l+1}(\pi a_0{}^3)^{1/2}}\left(\frac{a_0r^l}{l}+\frac{r^{l+1}}{l+1}\right)e^{-r/a_0}P_l(\cos\theta) \tag{33.21}$$

となる. (33.16) にしたがってこれは $\psi_1(\mathbf{r})$ に等しい. 同様に, (33.15) からわかるように W_2 は次式で与えられる.

$$W_2=\langle 0|H'|1\rangle=-Z^2e^2\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(l+2)(2l+1)!}{l2^{2l+1}}\frac{a_0{}^{2l+1}}{R^{2l+2}} \tag{33.22}$$

この場合でもやはり, ($l=1$ の) 支配的な項は $\mathsf{E}=-Ze/R^2$ とおけば (33.7) と一致する.

注意すべきことは, 確かに (33.22) は $1/R$ についての漸近級数の最初の二項を正しく与えてはいるものの, 第三項 ($1/R^3$ に比例する) になると W_3 の支配的な項の方が優ってくるということである. つまり, (33.17) からわかるようにこの場合 $W_3=\langle 1|H'|1\rangle$ となり, R の大きな値に対する W_3 の支配項は $1/R^7$ に比例しているのである.[1)]

1) A. Dalgarno and A. L. Stewart, *Proc. Roy. Soc.* (*London*) **A238**, 276 (1956). 前節で議論した van der Waals 相互作用の場合の事情とは違って, この問題の場合には遅延によって生じる補正は存在しないということは注意すべきである. というのは, 2個の固定された点荷電の静電ポテンシャル内での単一電子の運動がこの場合の唯一の運動になっているからである.

34□WKB 近似

量子力学の発展において前期量子論の Bohr-Sommerfeld の量子化の規則（§2）は古典力学と量子力学の中間の位置をしめているが，Schrödinger の波動方程式の近似的な取り扱いの中で，この量子化の仕方との関連を示す方法があるということは興味深い．この近似法は，波動関数を $\hbar$ の冪級数に展開することに基づいている．この展開は，元々半収斂或いは漸近的な性格のものであるが，それにもかかわらず適当な場合には，量子力学の問題の近似解を得るために役に立つのである．この方法は，一般的，数学的な技巧としては，Liouville, Rayleigh, および Jeffreys によって，古くから用いられていたものであるけれども，**Wentzel-Kramers-Brillouin 近似** ***Wentzel-Kramers-Brillouin approximation*** あるいは略して **WKB 近似**とよばれている[1]．この方法は，波動方程式が 1 個あるいはそれ以上の常微分方程式に分離できて，その各々が唯 1 個の独立変数を含むようにできるという条件のもとで応用できるものである．

34-1 古典論への極限

Schrödinger の波動方程式（6.16），

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi+V(\mathbf{r})\psi$$

の解 $\psi(\mathbf{r})$ は次の形に書ける．〔ただし，A は定数．〕

$$\psi(\mathbf{r},t)=A\exp\frac{iW(\mathbf{r},t)}{\hbar}.$$

この場合，W は次の方程式を満たしている．

---

1) これはときによると **BWK 法** ***BWK method***, **古典近似** ***classical approximation*** あるいは**位相積分の方法** ***phase integral method*** とよばれる．原論文としては次のものを見よ．J. Liouville, *J. de Math.*, **2**, 16, 418 (1837)；Lord Rayleigh, *Proc. Roy. Soc.* **A86**, 207 (1912)：H. Jeffreys, *Proc. London Math. Soc.* (2), **23**, 428 (1923)；G. Wentzel, *Zeits. f. Physik.*, **38** 518 (1926)；H. A. Kramers, *Zeits. f. Physik.*, **39**, 828 (1926)；L. Brillouin, *Comptes Rendus*, **183**, 24 (1926)．さらに最近の発展については，E. C. Kemble, "Fundamental Principles of Quantum Mechanics," (McGraw-Hill, New York, 1937) の §21；R. E. Langer, *Phys. Rev.*, **51**, 669 (1937)；W. H. Furry, *Phys. Rev.* **71**, 360 (1947)；S. C. Miller, Jr. -R. H. Good, Jr., *Phys. Rev.* **91**, 174 (1953) を見よ．この節の取り扱いは，Kramers と Langer のものに極めて近いものである．

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\frac{1}{2\mu}(\nabla W)^2+V-\frac{i\hbar}{2\mu}\nabla^2 W=0 \tag{34.1}$$

古典論への極限 ($\hbar\to 0$) において，(34.1) の方程式は，主関数 W に対するハミルトンの偏微分方程式と同じものになる[1]：

$$\frac{\partial W}{\partial t}+H(\mathbf{r},\mathbf{p})=0 \qquad \mathbf{p}=\nabla W$$

粒子の運動量は W の grad になっているから，粒子の可能な軌道は W が一定の面，したがって，古典論的な極限では波動関数 ψ の位相が一定の面に直交する．こうして，この極限においては，ψ に結びついた射線（位相一定の面に直交する曲線）が，古典的な粒子の可能な軌道になる．

もし ψ が，エネルギーの固有関数 $u(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$ ならば，W は

$$W(\mathbf{r},t)=S(\mathbf{r})-Et$$

と書くことができる．この場合には

$$u(\mathbf{r})=A\exp\frac{iS(\mathbf{r})}{\hbar}, \qquad \frac{1}{2\mu}(\nabla S)^2-[E-V(\mathbf{r})]-\frac{i\hbar}{2\mu}\nabla^2 S=0 \tag{34.2}$$

となる．WKB 法とは，一次元の場合について S を $\hbar$ の羃に展開し，（古典的な表式よりも一つだけ多い）最初の二つの項を求めることに他ならない．

34-2 近　似　解

ここで考える基礎方程式は，k および κ は常に実数であるとして，次の形式の中のどちらか一つの形に書かれるものである．

$$\frac{d^2u}{dx^2}+k^2(x)u=0 \qquad k^2>0 \tag{34.3}$$

$$\frac{d^2u}{dx^2}-\kappa^2(x)u=0 \qquad \kappa^2>0 \tag{34.4}$$

これらは，

$$\begin{aligned} V(x)<E \text{ のとき} \qquad k(x)&=+\frac{1}{\hbar}\{2\mu[E-V(x)]\}^{\frac{1}{2}} \\ V(x)>E \text{ のとき} \qquad \kappa(x)&=+\frac{1}{\hbar}\{2\mu[V(x)-E]\}^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{34.5}$$

---

1) E. T. Whittaker, "Analytical Dynamics," 第3版 (Cambridge, Lodon, 1927) の142節 ; H. Goldstein, "Classical Mechanics," (Addison-Wesley, Cambridge, Mass., 1950 ; 邦訳：野間　進訳「古典力学」吉岡書店，1959) の第9-1節．

とおけば，一次元の波動方程式（8.5）と同等である．また，方程式（34.3），（34.4）で，x を r と書き換え，$V(r)$ を

$$V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$

で置き換えれば，これらは動径部分の波動方程式（19.2）と同等で，u は動径部分の波動関数の r 倍に等しくなる．

さしあたっては，（34.3）式だけに注目することにしよう；このようにして得られる（34.3）の解としての $u(x)$ の最終的な表式を一般化してやれば（34.4）の解を得ることができるわけなのである．そこでまず，

$$u(x)=Ae^{iS(x)/\hbar}$$

とおいて，（34.3）に代入すれば（34.2）の一次元の形として次のものを得る．

$$i\hbar S''-S'^2+\hbar^2k^2=0 \tag{34.6}$$

ここで $'$ は x についての微分をあらわす．

S を $\hbar$ の冪に展開して（34.6）に代入し，$\hbar$ の同じ冪の項を等しいとおく．すなわち，

$$S=S_0+\hbar S_1+\cdots\cdots$$

$$-S_0'^2+2\mu(E-V)=0$$

$$iS_0''-2S_0'S_1'=0 \quad 等.$$

これらの方程式を積分すると，

$$S_0(x)=\pm\hbar\int^x k(x')dx', \qquad S_1(x)=\tfrac{1}{2}i\ln k(x)$$

を得る．ここでは，係数 A の中に含めてしまうことができる任意の積分定数は省いてある．こうして，このオーダーまでの近似では，次のような解が得られる．

$$u(x)=Ak^{-\frac{1}{2}}\exp\left(\pm i\int^x kdx\right), \qquad V<E \tag{34.7}$$

同様なやり方で，（34.4）の近似解は次のようになる．

$$u(x)=B\kappa^{-\frac{1}{2}}\exp\left(\pm\int^x \kappa dx\right), \qquad V>E \tag{34.8}$$

34-3 解の漸近的な性質

WKB 法によるこれらの解の正確さは，S の級数において相続いだ 2 個の項，S_0 と $\hbar S_1$

の大きさを比較することによって評価できる．S_0 は k が零にならない限り単調に増大する x の関数だから，比 $\hbar S_1/S_0$ は比 $\hbar S_1'/S_0'$ が小さければやはり小さいものと予想される．こうして，(34.7) は

$$\left|\frac{\hbar S_1'}{S_0'}\right| = \left|\frac{k'}{2k^2}\right| \ll 1 \tag{34.9}$$

となるような x の範囲で使えることが予想される．さて，局部的な de Broglie 波の波長 λ は $2\pi/k$ だから (34.9) は

$$\frac{\lambda}{4\pi}\left|\frac{dk}{dx}\right| \ll k$$

と書ける．これは距離 $\lambda/4\pi$ の間の，k（或は波長）の変化の割合が 1 に比べて小さいことを意味する．このように，ポテンシャルエネルギーがごくゆっくり変化し，粒子の運動量がいくつもの波長にわたって殆ど一定であるときに，WKB 解は有用なのである．

“波長”という言葉を，u の大きさが因子 $e^{2\pi}$ だけ変化する距離を意味するものとすれば，(34.8) に対しても同じ目安が得られる．

古典的運動の転回点すなわち $V(x)=E$ になる点の近傍では，k および κ は零で“波長”は無限大となって，条件 (34.9) が破れることは明らかである．したがって，(34.7) および (34.8) の解が漸近的に成り立つというのは次の意味においてなのである．すなわち，最も近い転回点から数波長はなれたところでの波長はゆっくりと変化しているのが通常の場合であるが，そのような場合にはその領域ではこれらの解を使うことができるわけである．

(34.7) のような振動型の解を，転回点を通って指数型の解 (34.8) とどのように結びつけるかがわかっている場合には，漸近解は最も役に立つものである．たとえば境界条件をあてはめてエネルギーの固有値を得るというようなことはこのようなやり方によるわけである．次に考察するようなこの種の**接続公式** *connection formula* を導き出す問題は，このような理由から興味がある．しかしながら，WKB 法の応用される場合接続が行なわれる正確なやり方にきわどく関係しない場合が多いということは注意されるべきことである．

34-4 転回点の近傍での解

波動方程式 (34.3) および (34.4) は転回点で正則だから，(34.7)，(34.8) のような

漸近形をもち，かつ転回点で解析的な一つの解がある．そのような解は通常閉じた形に書くことはできない．しかしながら，波動方程式を少し変形して，望みの漸近形を持つ正確な解が得られるようにすることはできる．

一般性を失なうことなしに，x の原点をある特定の転回点にとることができる；さらに，一応，転回点の右側（x の正の側）で $V(x)<E$ と仮定し，$\xi(x)\equiv\int_0^x k\,dx$ とおく．さて C を正の定数として，$k^2(x)=Cx^n$ であるとすれば，方程式（34.3）は J を Bessel 関数として

$$u(x)=A\,\xi^{\frac{1}{2}}k^{-\frac{1}{2}}J_{\pm m}(\xi),\qquad m=\frac{1}{n+2} \tag{34.10}$$

という解を持つことが知られている；このことは，直接代入してみれば確かめられる．J の漸近形は，〔後でわかるように〕(34.10）が漸近的に（34.7）に一致するようになっている．

そこで，$k^2(x)$ が x の冪になっていない場合でも，(34.3）を $\theta(x)$ という附加項を使って書き直して（34.10）の形の $u(x)$ がそのまま使えるようにすることを考えよう．

$$\frac{d^2u}{dx^2}+(k^2-\theta)u=0 \tag{34.11}$$

（34.10）を（34.11）に代入してみれば，もし θ を

$$\theta(x)\equiv\frac{3k'^2}{4k^2}-\frac{k''}{2k}+\left(m^2-\tfrac{1}{4}\right)\frac{k^2}{\xi^2} \tag{34.12}$$

と定義すれば，新しい方程式は満たされることがわかる．k^2 を x の冪級数として次のように展開する：

$$k^2(x)=Cx^n(1+ax+bx^2+\cdots\cdots).$$

このとき θ も級数に展開できるが，$1/x^2$ および $1/x$ の項は消えて，主要な項は次のような x に無関係なものになる．

$$\theta(x)\xrightarrow[x\to 0]{}\frac{3(n+5)a^2}{2(n+4)(n+6)}-\frac{3b}{n+6} \tag{34.13}$$

さて（34.11）が実際の波動方程式（34.3）のよい近似になっていることは次のようにして示すことができる．(34.12）の三つの項の各々と，漸近的な正確さの目安（34.9）の構造が似ていることから，もし WKB 法がそのまま使えるなら，漸近領域で $\theta\ll k^2$ であることが示される．転回点およびその近くでは，θ が一定であるのに k^2 は $x=0$

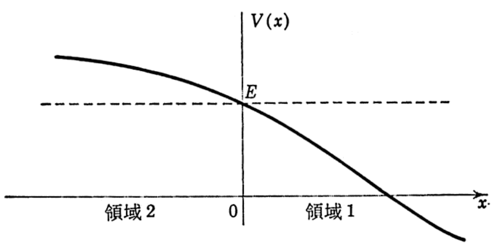
で零になるから，θ は k^2 に比べて無視できない．といっても，$\theta(0)$ は全く小さくて，k^2 からの偏差は，k^2 の簡単化された形 Cx^n を元にすれば二次のオーダー程度であることを（34.13）は示している．したがって，ポテンシャル関数 $V(x)$ がゆっくり変化しているものであれば，（34.10）が方程式（28.3）の実際の解のよい近似になっていることが予想されるのである．

34-5 一次の転回点

今，問題を物理的に最も興味のある $n=1$ という特別の場合に限定することにする．典型的な一次の転回点は28図に示してある；（34.3）式は領域 1（$x>0$）で，（34.4）式は領域 2（$x<0$）で使われる．$\xi_1\equiv\int_0^x kdx$，$\xi_2\equiv\int_x^0 \kappa dx$，とおいて，$\xi_1$ も ξ_2 も x が転回点から離れて行くにつれて増大するようにする；こうすれば，得られた結果を領域 1 と 2 が入れ替っている場合にまで一般化するのがたやすくなる．二つの領域の各々における二つの独立な解は，次のものになる．

$$\begin{aligned} u_1^{\pm}(x) &= A_{\pm}\xi_1^{\frac{1}{2}}k^{-\frac{1}{2}}J_{\pm\frac{1}{3}}(\xi_1) \\ u_2^{\pm}(x) &= B_{\pm}\xi_2^{\frac{1}{2}}\kappa^{-\frac{1}{2}}I_{\pm\frac{1}{3}}(\xi_2) \end{aligned} \qquad (34.14)$$

領域 2 では，J を虚因数の Bessel 関数 I で置き換えねばならないことは明らかである．



第28図 $x=0$ で $V(x)=E$ となる典型的な 1 次の転回点；ただし，領域 1 では $E>V(x)$，領域 2 では $E<V(x)$．

必要なのは，これらの関数の冪級数展開および漸近展開での支配的な項である．それらは，次のようになる．[1]

1) Whittaker and Watson, 前掲書, 第17章.

$$J_{\pm\frac{1}{3}}(\xi_1)\xrightarrow[x\to 0]{}\frac{(\frac{1}{2}\xi_1)^{\pm\frac{1}{3}}}{\Gamma(1\pm\frac{1}{3})}$$

$$\xrightarrow[x\to\infty]{}(\tfrac{1}{2}\pi\xi_1)^{-\frac{1}{2}}\cos\left(\xi_1\mp\frac{\pi}{6}-\frac{\pi}{4}\right)$$

$$I_{\pm\frac{1}{3}}(\xi_2)\xrightarrow[x\to 0]{}\frac{(\frac{1}{2}\xi_2)^{\pm\frac{1}{3}}}{\Gamma(1\pm\frac{1}{3})} \tag{34.15}$$

$$\xrightarrow[x\to\infty]{}(2\pi\xi_2)^{-\frac{1}{2}}(e^{\xi_2}+e^{-\xi_2}\cdot e^{-(\frac{1}{2}\pm\frac{1}{3})\pi i})$$

I に対する漸近展開において，$e^{-\xi_2}$ という項を残しておくことができるのは，e^{ξ_2} の係数が零になるように解 $I_{\pm\frac{1}{3}}$ の組合わせを選んだときに限られるということは注目すべき大切な点である．それは，漸近展開においては，e^{ξ_2}/ξ_2 というような他の項は省略されていたわけであるが，これらは大きさとしては $e^{-\xi_2}$ よりオーダーが高いからである．WKB 近似の漸近的な性質として転回点から離れるにつれて指数関数的に増大する項があるときには，指数関数的に減少する項もやはりそこにあるかないかをいうことができないようになっているのである．

34-6 転回点での接続

$x=0$ における k^2 の主要項は Cx だから $k\approx cx^{1/2}$, $\kappa\approx c|x|^{1/2}$, $\xi_1\approx(2c/3)x^{3/2}$, $\xi_2\approx(2c/3)|x|^{3/2}$ である．ただし $c=+C^{1/2}$. すると，(34.14) と (34.15) から u の $x=0$ の近くでの振舞いが求められる．

$$u_1^+\approx A_+\frac{(\frac{2}{3})^{\frac{1}{2}}(\frac{1}{3}c)^{\frac{1}{3}}}{\Gamma(\frac{4}{3})}x \qquad u_1^-\approx A_-\frac{(\frac{2}{3})^{\frac{1}{2}}(\frac{1}{3}c)^{-\frac{1}{3}}}{\Gamma(\frac{2}{3})}$$

$$u_2^+\approx B_+\frac{(\frac{2}{3})^{\frac{1}{2}}(\frac{1}{3}c)^{\frac{1}{3}}}{\Gamma(\frac{4}{3})}|x| \qquad u_2^-\approx B_-\frac{(\frac{2}{3})^{\frac{1}{2}}(\frac{1}{3}c)^{-\frac{1}{3}}}{\Gamma(\frac{2}{3})}$$

したがって，もし $B_+=-A_+$ なら u_1^+ は滑らかに u_2^+ に接続し，$B_-=A_-$ なら u_1^- は滑らかに u_2^- に接続することは明らかである．

これらの係数間の関係を使えば，二つの領域における 2 個の独立な解 u^+, u^- に対する，（任意の一定乗数 $A_\pm$ を省いた）(34.7) や (34.8) のような漸近形を求めることができる．

$$u^+\xrightarrow[x\to+\infty]{}(\tfrac{1}{2}\pi k)^{-\frac{1}{2}}\cos\left(\xi_1-\frac{5\pi}{12}\right)$$

$$
\begin{aligned}
&\xrightarrow[x\to-\infty]{} -(2\pi\kappa)^{-\frac{1}{2}}(e^{\xi_2}+e^{-\xi_2-5\pi i/6}) \\
u^- &\xrightarrow[x\to+\infty]{} (\tfrac{1}{2}\pi k)^{-\frac{1}{2}}\cos\left(\xi_1-\frac{\pi}{12}\right) \qquad (34.16)\\
&\xrightarrow[x\to-\infty]{} (2\pi\kappa)^{-\frac{1}{2}}(e^{\xi_2}+e^{-\xi_2-\pi i/6})
\end{aligned}
$$

u^+ と u^- の任意の一次結合の漸近形は，(34.16) 式から求めることができる．

34-7 漸近的な接続公式

二つの領域における漸近的な WKB 解の間の便利な接続公式は，u^+ と u^- の適当な一次結合を選ぶことによって得ることができる．u^++u^- という組合せは，ただ減少する指数関数だけを含み，第一の接続公式

$$\tfrac{1}{2}\kappa^{-\frac{1}{2}}e^{-\xi_2}\longrightarrow k^{-\frac{1}{2}}\cos(\xi_1-\tfrac{1}{4}\pi) \qquad (34.17)$$

を与える．(34.17) の矢印は，左辺にある領域2の漸近解は右辺にある領域1の漸近解へ移って行くが，その逆は必ずしも真ではないことを意味している．これは cos の位相に含まれる小さな誤差が，領域2では増大する指数関数を支配的な項として導入することになるからである[1)]．

u^+ と u^- のも一つの一次結合は次の第2の接続公式を与えることがわかる．

$$\sin\eta\kappa^{-\frac{1}{2}}e^{\xi_2}\longleftarrow k^{-\frac{1}{2}}\cos(\xi_1-\tfrac{1}{4}\pi+\eta) \qquad (34.18)$$

ここで η は零および π の整数倍とははっきり異なった値をとるとする．(34.18) 式のように矢印があらわれるのは，もし接続を逆向きにすれば，領域2において省略された減少する指数関数が領域1における cos の位相を不定の大きさだけ変えるからである．

34-8 ポテンシャルの凹みのもつエネルギー準位

次に Bohr-Sommerfeld の量子化法則の一つを導くのに役立つような WKB 近似の簡単な応用例を示す，29図に示すような一次元のポテンシャルの凹みの中を運動する粒子

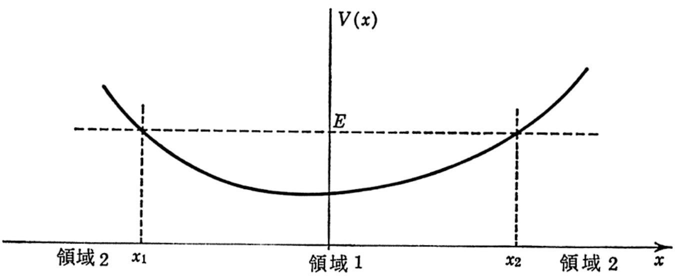
---

1) (34.17) の逆は次の意味で使うことができる．もし解に含まれるあるパラメーター（エネルギー E のような）が，領域1における cos の位相が $-\pi/4$ という値を通り過ぎるように，連続的に変化するならば，領域2の増大する指数関数は，位相が $-\pi/4$ の近くのある中間値をとるときに消えてしまい，減少する指数関数の項だけが残る．この結果は，たとえば重い核によるアルファー粒子の共鳴散乱の取り扱いの際に便利である．

のエネルギー準位を見出したいわけである．この場合，任意の仮定されたエネルギー準位Eに対して，

$$V(x_1)=V(x_2)=E$$

のような古典運動の転回点が，ちょうど2個あると考えられる．$x<x_1$ および $x>x_2$ の領域は，（上に述べた）領域2の型のものであって，そこではuが $\pm\infty$ での境界条件を満たすためには転回点から離れるにつれ減少することがわかっている．したがって，これらの領域では減少する指数関数型の WKB 解だけが存在することになる．



第29図 WKB 法のポテンシャルの凹みへの応用；一次の転回点は x_1 と x_2 にある．

接続公式（34.17）は，2の型の領域を1の型の領域 $x_1<x<x_2$ から分離している転回点 x_1 に適用できる．唯一つ変更すべきことは，ξ_1 の積分の下限を0から x_1 に変えることである．したがって転回点の右側での解は，任意の一定の乗係数を別にして

$$k^{-\frac{1}{2}}\cos\left(\int_{x_1}^{x} kdx-\tfrac{1}{4}\pi\right) \tag{34.19}$$

となる．同じ接続公式は，x軸の向きを逆にし，ξの積分の固定された極限を0から x_2 に変えれば，転回点 x_2 にも適用できる；（34.17）の矢印はこの場合にもやはり領域2の解から領域1の解へ移ることを意味するが，しかし今度は，後者が転回点の左側にあり，前者が右側にある．ξ が転回点からはなれるにつれて増加するように，$\xi_1=\int_{x}^{x_2} kdx$，$\xi_2=\int_{x_2}^{x}\kappa dx$ と定義し直すと，この場合にも（34.17）は何の変更も加えないで使える．結局，この転回点の左側での解は $k^{-\frac{1}{2}}\cos\left(\int_{x}^{x_2} kdx-\frac{1}{4}\pi\right)$ となり，これはまた

$$k^{-\frac{1}{2}}\cos\left(\int_{x_1}^{x} kdx-\tfrac{1}{4}\pi-\eta\right),\qquad \eta\equiv\int_{x_1}^{x_2} kdx-\tfrac{1}{2}\pi \tag{34.20}$$

と書き直せる．

§8 における離散的なエネルギー固有値の定性的な議論の場合と同様に，二つの解（34.19）と（34.20）が領域1の内部で滑らかに結びつくことを要求すればこの系のエネルギー準位を求めることができる．明らかにこのことから，$\int_x^{x_2} kdx$ は当然正だから，η が零もしくは π の正の整数倍になることが要求される．そして固有値を決める方程式は

$$\int_{x_1}^{x_2} kdx=(n+\tfrac{1}{2})\pi \qquad n=0,1,2,\cdots\cdots \tag{34.21}$$

と書ける．（34.21）式はEが大きくなって転回点の一方または両方が消え失せてしまうようなnの値になるまで使うことができる．

34-9 量子化の規則

k の表式（34.5）を（34.21）へ代入すれば，前期量子論の Bohr-Sommerfeld の量子化の規則の中の一つを与えることができる．すなわち，

$$2\int_{x_1}^{x_2} \{2\mu[E-V(x)]\}^{\frac{1}{2}} dx=(n+\tfrac{1}{2})h. \tag{34.22}$$

（34.22）の左辺は，運動量 $[2\mu(E-V)]^{1/2}$ の運動の〔x_1 から x_2 へ，それから x_1 までもどる〕完全な1サイクルにわたる積分である．右辺は，整数ではなく半整数の量子数をもった位相積分の量子論的な値になっている．

解（34.20）の形から容易にわかるように，n は WKB 波動関数の転回点の間の節の数になっている．WKB 法にとっては，各転回点から数波長はなれたところでだけ，漸近解を（34.7）のように展開できるということが基本的だったから，この方法がよい近似であるのは，転回点が数波長以上はなれている場合，あるいはnが1に比べて大きいときにだけに限られる．これは WKB 法が量子数の大きい，殆ど古典論的な極限において最も有用だということであり，WKB 法が半古典的な近似であるという前にのべた見方がこれによって確かめられているわけである．

実際には，量子数の小さな状態に対してもまた，WKB 近似は極めてよい結果を与える．たとえば，（34.22）を調和振動子 $V(x)=1/2Kx^2$ に適用すればすべての量子数に対したまたま正しいエネルギー準位の得られるということは，すでに古典量子論からわかっていることである（問題16 を見よ）．

34-10 特別の境界条件

〔V が $x=x_0$ で不連続的に $+\infty$ に変る〕完全剛体の壁において，WKB 解に適用されるべき境界条件は波動関数がそこで零になることである．だから，もし（1の型の領域に対して）k が x_0 までゆっくり変化し，同時に他の転回点が遠くにあるものとすれば，漸近解が使えてそれは

$$k^{-\frac{1}{2}}\sin\left(\int_{x_0}^{x} k\,dx\right)$$

という形を持つことになる．

同様に，他の転回点からずっとはなれた点での有限なポテンシャルの階段に対しても，k あるいは κ がゆっくり変化していくのならば，漸近的な WKB 解が V の不連続点までは使える．

(34.5) 式の後で指摘しておいたように，WKB 法は球対称ポテンシャルに対する動径部分の波動方程式へも応用できる．$l=0$ のときは，動径部分の波動関数は $r=0$ で有限，したがって u はそこで零にならなければならない．もし k または κ がそこでゆっくり変化しておれば漸近解を使うことができる；たとえば，もし $E-V(r)$ が，正で有限，かつ $r=0$ の点，およびその近傍でゆっくり変化しているならば，解は $k^{-\frac{1}{2}}\sin\left(\int_0^r kdr\right)$ である．V 自身が $r=0$ で無限大になるか，あるいは $l\neq 0$ に対する遠心力の寄与のために，ポテンシャルエネルギーの有効値がそこで無限大になるときには，事情はもっと複雑になり，さらに詳しく吟味する必要がある．

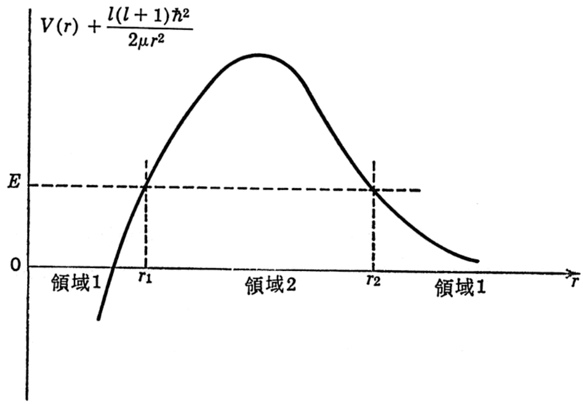
34-11 障壁の貫通

第30図 は動径座標の関数として描かれた，一つの典型的なポテンシャル障壁を示している；このポテンシャルには (34.5) 式のすぐ後で指摘しておいたような遠心力の項が含まれている．2の型の領域では，波動関数は (34.8) の形の実の指数関数になる．したがってもしも $\int_{r_1}^{r_2}\kappa dr$ が1に比べてかなり大きくなっているならば，解の性質は2個の転回点での波動関数の大きさの比によって支配されることになる．これに対応する確率の比，すなわち波動関数の比の2乗を**障壁透過因子** ***barrier penetration factor*** P とよぶ．すなわち

$$P=\exp\left[-2\int_{r_1}^{r_2}\kappa(r)\,dr\right] \qquad \text{ただし}$$

$$\kappa(r)=+\frac{1}{\hbar}\left\{2\mu\left[V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}-E\right]\right\}^{\frac{1}{2}} \tag{34.23}$$

§17の終りで述べた角型のポテンシャル障壁に対する貫通現象は，この問題の特別な場合に他ならない．容易にわかるように(17.8)式中で支配的な指数因子はちょうど(34.23)で与えられるPになっている．



第30図　動径座標を独立変数とするポテンシャル障壁へのWKB法の応用．

放射性のα崩壊の場合には，$V(r)=+ZZ'e^2/r$．ただし，Zは終末核の原子番号で$Z'=2$である．ポテンシャルに対するこの表式は$r>R$の領域に対してのみ適用可能であると仮定する；つまりこの核半径Rの内部ではクーロンの斥力を帳消しにしてさらにそれを上回る強い引力があるとする．したがって$r_1=R$. $l=0$に対しては$r_2=ZZ'e^2/E$，ただし$E=\frac{1}{2}\mu v^2$．したがって$\gamma\equiv ZZ'e^2/ER$をクーロン力の障壁の高さととび出してくるα粒子の運動エネルギーの比とすれば，

$$\int_{r_1}^{r_2}\kappa(r)dr=\frac{(2\mu)^{\frac{1}{2}}}{\hbar}\int_R^{ZZ'e^2/E}\left(\frac{ZZ'e^2}{r}-E\right)^{\frac{1}{2}}dr$$
$$=\frac{\pi ZZ'e^2}{\hbar v}\left(1-\frac{2}{\pi}\sin^{-1}\frac{1}{\gamma^{1/2}}\right)-\frac{\mu vR}{\hbar}(\gamma-1)^{\frac{1}{2}} \tag{34.24}$$

α崩壊に対する寿命は，ある特性的時間τを(34.23)および(34.24)とから求められたPで割ったオーダーのものになることが予想される．この場合には，波動関数はr_2

での値に比べて r_1 ではるかに大きくなっているから，τ は大雑把には半径 R の核の引力ポテンシャル内部での1個の α 粒子の振動の程度になる．$\tau \sim 10^{-21}$ sec また R は 10^{-12} cm に比べて幾分小さい程度としてみると，透過因子が 10^{24} 程度の寿命の領域にわたって，観測された寿命の Z および E による変化と良好な一致が得られる．

この障壁透過因子はまた，核反応の率にも効いてくる．この場合の波動関数の値は r_1 での値に比べて r_2 での値がはるかに大きくなっており，その P は $R=0$ としたとき，(21.14) の次のところで定義された Gamow 因子と一致することは明らかである．

もう一つの例として，零エネルギーの粒子は束縛状態をつくれるかどうかという問題を考えてみる；この問題は §19 および §39 の議論に関連して興味がある．$E=0$ のときには

$$\int_{r_1}^{r_2} \kappa(r)dr = \frac{(2\mu)^{\frac{1}{2}}}{\mu}\int_{r_1}^{r_2}\left[V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]^{\frac{1}{2}} dr. \tag{34.25}$$

もしも $l=0$ で $V(r)$ が有限の作用距離をもつ場合にはこの積分は有限で，$P\neq 0$ となる．同様にもしも $V(r)$ が無限遠にまでおよんでいて，ただし大きな r に対して $1/r^2$ よりも早く減少する場合には，この積分は $r_2=\infty$ のときにも有限になる．一方，もしも $l>0$ とすれば (34.25) は無限大になり，$P=0$ となる．つまり §19 の末尾近くで注意しておいたように，零エネルギーでの共鳴からは，l が零でない場合には真の結合状態が導かれることになる．

この節の始めの方で指摘しておいたように，ここでとられている WKB の応用は転回点をとおっての接続の正確なやり方によってきわどく変化するものでない．要するに，(34.22) の量子化の規則の導出の際に，接続の公式 (34.22) を利用して導かれるのは，右辺にあらわれている数½だけである；障壁の貫通現象の議論は全く接続公式に関係していないのである．

35□時間を含む問題に対する方法

ハミルトニアンが時間を含んでいるときには，Schrödinger 方程式の定常的な解は存在しない．したがって，束縛状態を離散的なエネルギー準位と定常的固有関数とみなす考え方は修正されなければならない．この節では，この種の修正を行ないうると同時に，それぞれがある特別の種類の近似に相当している三つのやり方を考えることにする．時

間を含む摂動理論, *time-dependent perturbation theory*, ときには**定数変化の方法** *method of variation of constants* ともよばれることのあるこの方法は，ハミルトニアン H の中の H_0 を簡単な構造のもの，H' を小さい摂動として，次のように仮定する点では，§31 と同様である．

$$H=H_0+H' \qquad H_0u_k=E_ku_k \tag{35.1}$$

ただし，今度の場合，H' は時間を含んでおり，H' が存在しなければ定常的であるはずの H_0 の固有状態間に遷移を引き起こす効果をもつことになる．別の考え方として，ハミルトニアンを（35.1）にしたがって分解するのでなく，Hが時間とともに極めてゆっくり変化するパラメーターを含んでいると仮定するやり方が，**断熱近似** *adiabatic approximation* である．つまりその系は瞬間的なハミルトニアンの定常的な固有関数を使って近似的に記述されるものと予想するわけである．最後に考察する**瞬間近似** *sudden approximation* では，Hが一つの形から他の形のものに変化するごく短い時間々隔を除いて，Hは時間について一定であると仮定されている．

35-1 時間を含む摂動論[1]

ここでは（31.1）の第一式とは異なって，次の時間を含む Schrödinger 方程式を取り扱わねばならない．

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi \tag{35.2}$$

その手つづきは，ψ を無摂動の時間を含まない波動方程式の固有関数 $u_ne^{-iE_nt/\hbar}$ について展開してみることである．ただしその場合展開係数が時間を含むことは明らかである．すなわち

$$\psi=S_na_n(t)u_ne^{-iE_nt/\hbar} \tag{35.3}$$

（35.3）を（35.2）に代入すれば

$$S_ni\hbar\dot{a}_nu_ne^{-iE_nt/\hbar}+S_na_nE_nu_ne^{-iE_nt/\hbar}=S_na_n(H_0+H')u_ne^{-iE_nt/\hbar}$$

となる．ただし，上つきのドットは時間についての微分を表わすものとする．

右辺で H_0u_n を E_nu_n で置き換え，左から u_k^* を加えて全空間について積分し，u_n の規格直交性を使うと次のようになる．

---

1) P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.* (*London*) **A112**, 661 (1926) ; **A114**, 243 (1927).

$$i\hbar\dot{a}_k e^{-iE_k t/\hbar} = S_n a_n e^{-iE_n t/\hbar}\langle k|H'|n\rangle$$

ここで Bohr の（角）振動数 ω を

$$\omega_{kn} \equiv \frac{E_k - E_n}{\hbar} \tag{35.4}$$

で定義すると，結局次の方程式が得られる．

$$\dot{a}_k = (i\hbar)^{-1} S_n \langle k|H'|n\rangle a_n e^{i\omega_{kn}t} \tag{35.5}$$

すべての k に対する（35.5）の方程式のグループはもとの Schrödinger 方程式（35.2）と正確に同等になっている．

35-2 相互作用からの見方

（35.2）から（35.5）へ移行する際に，2種類の変化がなされてきている．第一には，**表示** ***representation*** が座標を用いて指定されたものから無摂動エネルギー固有値を用いて指定されるものへ変更されている（§23 を見よ）．第二は，**見方** ***picture*** が Schrödinger 流の見方から相互作用の見方へ変更されている（§24 を見よ）．これら二種の変化を少し詳しく検討してみることは価値がある．Schrödinger 流の見方でのケット $|\alpha_S(t)\rangle$ は波動関数 ψ に対応しており，無摂動ハミルトニアン H_0 の固有値を用いた表示をもっていて

$$\langle k|\alpha_S(t)\rangle = (u_k, \psi) = a_k(t)e^{-iE_k t/\hbar} \tag{35.6}$$

となる．ただし，ここで（35.3）が利用されている．相互作用からの見方でのケットは（24.12）の第一式から求めればよく，同じ表示では次のようになる．

$$\langle k|\alpha_I(t)\rangle = \langle k|e^{iH_{0S}t/\hbar}|\alpha_S(t)\rangle = \langle k|e^{iH_{0S}t/\hbar}|n\rangle\langle n|\alpha_S(t)\rangle$$

ただし右辺の和は S_n の意味である．この表示では H_{0S} は対角型になっているから，右辺の最初のブラケット表式は $e^{iE_k t/\hbar}\langle k|n\rangle$ に他ならない．したがって，（35.6）を使って

$$\langle k|\alpha_I(t)\rangle = a_k(t)$$

であることがわかる．

（35.1）あるいは（35.5）にあらわれている摂動は，Schrödinger流の見方で与えられており，その意味では H_S' と書かれるべきである．相互作用の見方での摂動は（24.2）の第二式から求められて，ここで用いられている表示では次のようになる．

$$\langle k|H_I'|n\rangle = \langle k|e^{iH_0st/\hbar}|j\rangle\langle j|H_S'|l\rangle\langle l|e^{-iH_0st/\hbar}|n\rangle$$
$$= e^{iE_kt/\hbar}\langle k|H_S'|n\rangle e^{-iE_nt/\hbar}$$
$$= \langle k|H_S'|n\rangle e^{i\omega_{kn}t}$$

したがって，H_0 表示で表わした相互作用の見方でのケットに対する運動方程式（24.13）は（35.5）と同一のものになる[1]．

35-3 一次の摂動

ここで（35.5）にもどって，H' を $\lambda H'$ で置き換え，さらに a を次のように λ についての冪級数として表わすことにする．

$$a_n = a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)} + \lambda^2 a_n^{(2)} + \cdots\cdots \tag{35.7}$$

§31 と同様に，この級数は 0 と 1 との間の λ に対して λ の連続解析関数であると仮定する．そうすれば，（35.7）を（35.5）に代入し，λ の対応する冪の係数を等しいとして，最後の結果で $\lambda=1$ と置くことができる．この代入の結果として次の方程式系が得られる．

$$\dot{a}_k^{(0)} = 0 \qquad \dot{a}_k^{(s+1)} = (i\hbar)^{-1} S_n \langle k|H'|n\rangle a_n^{(s)} e^{i\omega_{kn}t} \tag{35.8}$$

これらの方程式は，原理的には逐次積分可能であって，その結果摂動について任意の望むオーダーまでの近似解が得られるわけである．

（35.8）の第一式は，零オーダーの係数 $a_k^{(0)}$ が時間について一定であることを示している．それらの値は問題の初期条件で，摂動がかけられる前のその系の状態を指定することになる．そこで $a_k^{(0)}$ はその中の一つを除いてすべて零であると仮定しよう．つまり，その系は最初ある確定した無摂動エネルギー状態にあるわけである．[2] このようにして得られる結果を，零次のオーダーの係数の中の一つ以上が零と異なっているという情況にまで容易に拡張することができる．

そこで，初期状態 m が離散的な組の一つであるか連続的な組の一つであるかに応じて $a_k^{(0)} = \langle k|m\rangle = \delta_{km}$ あるいは $\delta(k-m)$ とおく．1次のオーダーの方程式を積分

1) この方程式は時間を含む摂動論との関連で Dirac（前掲論文）によって，初めて得られたものであるため，相互作用からの見方は**デイラック流の見方** ***Dirac picture*** とよばれることがある．

2) このことは必ずしも不確定性関係（3.3）と矛盾することにはならない．というのは，摂動の適用以前の時間の無限の経過がその系のもとのエネルギーを任意に大きな精度で決定することを可能にしているからである．

して次式が得られる.

$$a_k^{(1)}(t)=(i\hbar)^{-1}\int_{-\infty}^{t}\langle k|H'(t')|m\rangle e^{i\omega_{km}t'}dt' \tag{35.9}$$

ただし, $a_k^{(1)}$ は $t=-\infty$ (すなわち, 摂動がかけられる前) では零であるため, 積分定数は零ととられている. もしも H' が有限の持続時間をもつものであれば, 摂動が消滅した後でのある状態 u_k $(k\neq m)$ の振幅は, (35.4) で与えられている角振動数 ω_{km} に対応する摂動の k 状態と初期状態 (m) との間の行列要素の時間的なフーリエ成分に比例するわけである.

35-4 調和振動的な摂動

摂動 H' の時間の含み方が, ある時刻に H' がかかり, その後のある時刻にそれが切れるという点を除いて調和振動的になっている場合には, (35.9) の方程式は特に簡単な形をとることになる. H' がかかったり切れたりする二つの時刻をそれぞれ 0 および t_0 とし, さらに H' の行列要素を次のように書くことができるものと仮定する.

$$\langle k|H'(t')|m\rangle=2\langle k|H'|m\rangle\sin\omega t' \tag{35.10}$$

ただし, $\langle k|H'|m\rangle$ は時間を含まず, ω は正と定義されている. (35.10) を (35.9) に代入すれば, 時刻 t_0 およびそれ以降の任意の時刻 t における一次のオーダーの振幅に対して次式が得られる.

$$a_k^{(1)}(t\geq t_0)=-\frac{\langle k|H'|m\rangle}{i\hbar}\left(\frac{e^{i(\omega_{km}+\omega)t_0}-1}{\omega_{km}+\omega}-\frac{e^{i(\omega_{km}-\omega)t_0}-1}{\omega_{km}-\omega}\right) \tag{35.11}$$

(35.11) の構造から次のことが示唆される. すなわち, 振幅が零と異なってくるのは, (35.11) の右辺の二項の中の一方または他方の分母が実質的に零になる場合に限られるということである. 第一項は $\omega_{km}\approx-\omega$ すなわち $E_k\approx E_m-\hbar\omega$ の場合に重要になり, 第二項が重要になるのは $\omega_{km}\approx\omega$ すなわち $E_k\approx E_m+\hbar\omega$ の場合である. つまり時間について角振動数 ω で正弦的に変化している摂動の一次の効果は, それが作用している系に Planck のエネルギー量子 $\hbar\omega$ を与えるか, または $\hbar\omega$ をそれから受け取るかのいずれかである.[1] この概念は第XI章で輻射過程を取り扱うのに利用されるはず

1) このことは時間を含まない行列要素 $\langle k|H'|m\rangle$ を定義する際 (35.10) の右辺に因子 2 を挿入することの理由と関係している. $\sin\omega t$ または $\cos\omega t$ に比例する摂動は, 時間因子 $e^{i\omega t}$ と $e^{-i\omega t}$ の両方を同じ振幅で含んでいる. 時間因子 $e^{-i\omega t}$ だけからは, 摂動から無摂動系へのエネルギーの移行が導かれるので, 因子 2 の挿入は物理的に重要な摂動の行列要素は $\langle k|H'|m\rangle$ であって, この量の半分ではないということを保証しているわけである.

である.

さしあたり，始状態mはある離散的な束縛状態で，終状態kは解離状態の連続的な組の一つになっているという状況に話を限定することにする．その場合は $E_k>E_m$ となり，(35.11) の第二項だけを考察すればよいことになる．摂動が取り除かれた後でその系を状態kに見出す一次の確率は次のものになる．

$$|a_k^{(1)}(t\geq t_0)|^2=\frac{4|\langle k|H'|m\rangle|^2\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t_0}{\hbar^2(\omega_{km}-\omega)^2} \tag{35.12}$$

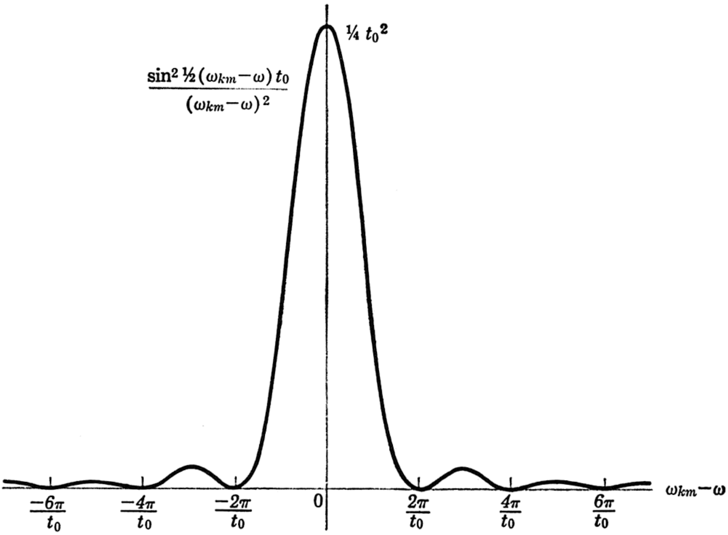
35-5 遷移確率

第31図は $\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t_0/(\omega_{km}-\omega)^2$ という因子を $\omega_{km}-\omega$ の関数として描いたものである．主なピークの高さは t_0^2 に比例して増大し，その幅は t_0 に逆比例して減少する．その結果，曲線の下の面積は t_0 に比例することになる．したがって，$E_m+\hbar\omega$ に殆ど等しいエネルギーをもつ一群のk状態が存在し，それらに対して $\langle k|H'|m\rangle$ が大体kに無関係になっているという場合には，この系をこれらの状態の中のどれかに見出す確率は t_0 に比例することになる．このことは物理的に興味のある状況である．なぜならば，結局のところ計算したいのは**単位時間当りの遷移確率** ***transition probability per unit time w*** なのであり，このことは，摂動がある時間 t_0 の間かけられてきていたその後である遷移がおこる確率は t_0 に比例することを意味しているからである.[1]

それらに向って遷移が生じている終状態のエネルギーの拡がりは次のような工合に不確定性関係と関係している．摂動 H' をその系を k 状態の一つに移すことによって，その系の最終エネルギーを測定する一つの道具と見なすことができる．この測定に利用できる時間は t_0 である．したがって (3.3) から予想されるエネルギーについての不確定性は $\hbar/t_0$ のオーダーになる．この結果は第31図中の主なピークの幅と一致している．注目すべき興味ある点は，$E_k\approx E_m+\hbar\omega$ という関係によって表わされ，不確定性原理によって適当に修正されたものとしてのエネルギーの保存則が，計算の自動的な

---

1) あらゆる状態kへの全遷移確率は 1に比べて十分小さく，その結果始状態mが実質的に空になることはないものと仮定されている．このことは摂動が小さいとするそもそもの仮定と同等である．摂動が小さいということは，物理的に問題になる時間t_0の間には，始状態については殆ど変化が見られないことを意味しているからである．ただし，もしも莫大な個数の独立な系が同一の取り扱いをうけるならば，このような場合にでもなお観測可能な程度の大きさの効果が存在しうるのである.



第31図 縦軸はエネルギー $E_k \equiv E_m + \hbar\omega_{km}$ の状態にある系を見出す一次の摂動による確率に比例している；第二のピークの高さは $1/(\omega_{km}-\omega)^2$ のように減少する．

結果の一つになっていて，別の仮定として挿入しなければならないということになっていないという点である．

単位時間当りの遷移確率は (35.12) を k について積分し，それを t_0 で割ることによって与えられる．すなわち

$$w = \frac{1}{t_0}\int |a_k^{(1)}(t \geq t_0)|^2 \rho(k) dE_k \tag{35.13}$$

ただし，$\rho(k)dE_k$ は E_k と E_k+dE_k との間のエネルギーをもつ終状態の個数である．解離状態の連続的な組の中のどれか一つの状態へ遷移が行なわれる場合を考えている以上，エネルギー密度 $\rho(k)$ という概念は意味があるわけである．ここで第31図の主なピークの幅が t_0 が大きくなるとともに小さくなるという事実を利用する．また $\langle k|H'|m\rangle$ および $\rho(k)$ の E_k による変動は十分小さいものと見なす．つまりそのためこれらの項は (35.13) の積分の外にとり出すことができるものと考える．積分変数を E_k から $x \equiv \frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)$ へ変更し，x についての積分の限界を $\pm\infty$ にまで拡張することによっ

てこの積分をさらに簡単化する．その場合，（35.12）を（35.13）に代入してみれば次式が得られる．[1]

$$w=\frac{2\pi}{\hbar}\rho(k)|\langle k|H'|m\rangle|^2 \qquad (35.14)$$

ただし，ここで $\int_{-\infty}^{\infty}x^{-2}\sin^2 x dx=\pi$ という結果を利用してある．この w に対する表式は予想通り t_0 を含んでいない．

ほぼ同じエネルギー $E_m+\hbar\omega$ をもつ終状態のいくつかの異なったグループ k_1, k_2……があって，それらに対する摂動行列要素 $\langle k_i|H'|m\rangle$ および状態の密度 $\rho(k_i)$ がそれぞれのグループ内ではほぼ一定になっていても，あるグループから他のグループへそれぞれ異なっているという場合がありうる．その場合 k を k_i で置き換えた（35.14）は i 番目のグループへの単位時間当りの遷移確率を与えることになる．

もしも終状態が始状態同様に離散的であるならば，以上のような扱い方で時間に比例する遷移確率を得ることはうまくゆかないことは明らかである．この場合には，（35.12）式からわかるように，$|a_k^{(1)}(t\geq t_0)|^2$ は特異なふうに t_0 および $\omega_{km}-\omega_0$ を含むことになる，この事情については輻射過程に関連して第Ⅺ章で立ちもどることにする．

35-6 水素原子の電離

一次の時間を含む摂動論の一例として，ここでは最初基底状態にある水素原子が時間について調和振動的に変化する電場内におかれた場合の電離の確率を計算しよう．この水素原子はたとえば，交流電圧がかけられている蓄電器の両極板の間に置かれているものと考えておいてよい．もちろん，電離をおこさせるためには電場の円振動数 $\omega/2\pi$ は $\mu e^4/4\pi\hbar^3=3.6\times10^{15}$ サイクル/秒 以上でなければならないから，このような状況は現実的なものではない．しかし，蓄電器にはよってつくり出される電場は，スペクトルの紫外部にある今あげた振動数の進行電磁波に伴われている電場に対する一つのモデルと見なすことができる．

1）（35.14）式および $\omega=0$ のときのそれに対応する公式（これについては§37 で論じるつもりである）はいずれも極めて利用価値があるもので，E. Fermi ("Nuclear Physics" (University of Chicago Press, Chicago, p. 142 1950)；邦訳：小林他訳「原子核物理学」(吉岡書店)，404頁）によって，「第二の黄金則」(Golden Rule No. 2) とよばれている．

摂動 H' は (31.26) で与えられているが，ここでは (35.10) に対応してそれを次のように書いておくことにする．

$$\mathsf{E}(t)=2\mathsf{E}_0\sin\omega t \tag{35.15}$$

始状態である水素原子の基底状態は (16.24) から $Z=1$ とおいて求められる．

$$u_m=u_{100}(\mathbf{r})=(\pi a_0{}^3)^{-\frac{1}{2}}e^{-r/a_0} \tag{35.16}$$

終状態は陽子のクーロン場内での正エネルギーの電子の運動に対応するはずである（散乱状態）．しかしながら，§21 での議論から推察されるように，この種の波動関数はかなり複雑なものになるので，電離が起こった後はクーロン相互作用を無視するというずっと簡単な近似的状況だけに考察を限ることにするのが賢明である．そうすれば，終状態は自由粒子の運動量固有関数（平面波）になるわけである．規格化としては箱を使った規格化を利用するのが便利で，その結果，終状態は

$$u_k=L^{-\frac{3}{2}}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \tag{35.17}$$

となる．ただし，$\hbar\mathbf{k}$ は放出される電子の運動量である．

35-7 終状態の密度

終状態の密度は箱の中での $\mathbf{k}$ に許される値，$k_x=2\pi n_x/L$ 等々，から求めることができる．ただし，n は正あるいは負の整数または零である．つまり，伝播ベクトルの領域 $dk_xdk_ydk_z$ 内には $(L/2\pi)^3dk_xdk_ydk_z$ 個の状態がある．エネルギーの保存から関係 $E_k=E_m+\hbar\omega$ すなわち $\hbar^2k^2/2\mu=-\mu e^4/2\hbar^2+\hbar\omega$ が与えられている．したがって $\mathbf{k}$ の大きさは固定されているわけである．しかしながら，(35.14) に現われている行列要素は $\mathbf{k}$ の方向に関係するはずである．したがって終状態 $\mathbf{k}$ をグループにわけて定義し，それぞれのグループが放出された電子の運動についてその方向の無限小領域に対応するようにしておく方が合理的である．そこで上に直角座標で与えられている伝播ベクトルの領域を，球座標を使って $k^2dk\sin\theta d\theta d\phi$ と書き直すことにする．ただし，θ,ϕ はある方向（ここでは便宜上電場の方向にとっておく）に関する $\mathbf{k}$ の極角座標である．つまり $\rho(k)dE_k$ は $(L/2\pi)^3k^2dk\sin\theta d\theta d\phi$ に等しいことになる．ここで dE_k と dk の関係は $E_k=\hbar^2k^2/2\mu$ という方程式を微分することによってきまる．結局，終状態の密度 $\rho(k)$ としては次の表式が得られる．

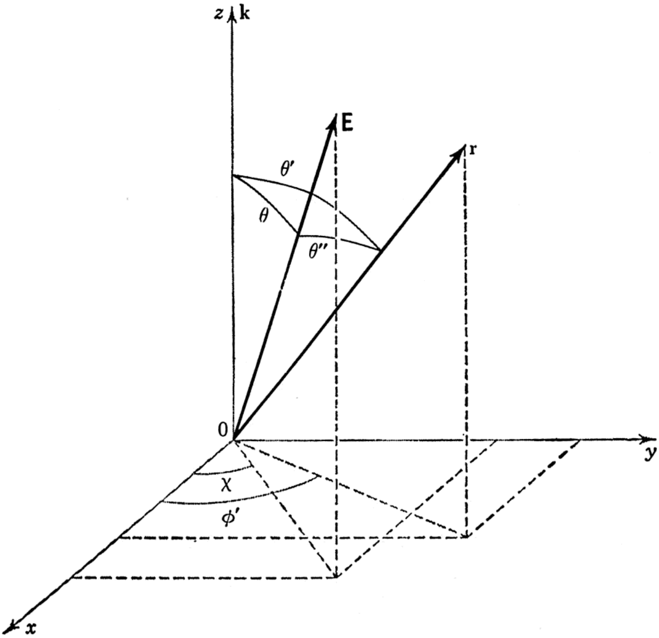
$$\rho(k)=\frac{\mu L^3}{8\pi^3\hbar^2}k\sin\theta d\theta d\phi \tag{35.18}$$

35-8　電離確率

(35.14) に挿入されるべき行列要素は (31.26), (35.10), (35.15) から求められ，始状態および終状態の波動関数は (35.16) および (35.17) から得られる．その結果は次のようになる．

$$\langle k|H'|m\rangle=eE_0(\pi a_0{}^3L^3)^{-\frac{1}{2}}\int e^{-ikr\cos\theta'}r\cos\theta'' e^{-r/a_0}d^3r \tag{35.19}$$

ただし，θ' は $\mathbf{r}$ と $\mathbf{k}$ との間の角で，θ'' は $\mathbf{r}$ と電場との間の角である．§35.7 で注意しておいたように，$\mathbf{k}$ と電場との間の角を表わすのに θ が使われている．ベクトル $\mathbf{r}$ の方向についての積分を実行するには，極軸として $\mathbf{k}$ を使う（その場合には θ'' を θ' と θ を使って表わさねばならない）か，極軸として電場の方向を使う（この場合には θ'



第32図　行列要素 (35.19) の積分のための図

を θ'' と θ とを使って表わさねばならない）かのどちらかのやり方をすればよい．前者の手つづきを採用して，

$$\cos\theta''=\cos\theta'\cos\theta+\sin\theta'\sin\theta\cos(\phi'-\chi)$$

とおくのが比較的簡単である．第32図に示されているように，ここの θ',ϕ' は極軸としての $\mathbf{k}$ に関する $\mathbf{r}$ の極角座標で，θ,χ は $\mathbf{k}$ に関する電場方向の極角座標である．

ここまでくれば（35.19）中の d^3r を $-r^2drd(\cos\theta')d\phi'$ でおきかえることができる．ϕ' についての積分を行なってみれば $\cos\theta''$ に対する上の表式の第二項は消えることになる．行列要素の計算の残りの部分には問題はなく，次の結果が導かれる．

$$\langle k|H'|m\rangle=-\frac{32\pi ie\mathrm{E}_0ka_0^5\cos\theta}{(\pi a_0^3L^3)^{1/2}(1+k^2a_0^2)^3}$$

この行列要素を $\rho(k)$ に対する（35.18）の表式とともに（35.14）に代入すれば，水素原子の電子が立体角 $\sin\theta d\theta d\phi$ 中に放出される単位時間当りの確率として次の表式が与えられる．

$$w=\frac{256\mu k^3e^2\mathrm{E}_0^2a_0^7}{\pi\hbar^3(1+k^2a_0^2)^6}\cos^2\theta\sin\theta\,d\theta d\phi \qquad (35.20)$$

つまり，単位立体角当りの微分的な電離確率 $w/(\sin\theta d\theta d\phi)$ は $\cos^2\theta$ に比例する．このことは驚くべきことではない．なぜならば，電子の確率振幅としては電子に作用する起動力の放出方向への成分すなわち $e\mathrm{E}_0\cos\theta$ に比例しているものと予想されるからである．この表式で与えられている w の ω による変化の仕方が最も信用できるのは ω が大きい場合である．というのは，その場合には k もまた大きくなり，平面波とした終状態が陽子のクーロン場からうける修正の重要性が最も稀薄になるものと予想されるからである．このことは（21.13）からも納得できることである．つまり大きな k すなわち小さな n に対しては，$|u_e(0)|^2$ は $1/v$ に近ずくことが（21.13）からわかるが，これは単位の流束に規格化された平面波の $r=0$ における確率密度に他ならないからである．

35-9 二次の摂動

二次の摂動を真正直に問題にしようとすれば，（35.11）のような表式を（35.8）の第二式の右辺に代入し，その結果得られた $\dot{a}_k^{(2)}$ に対する方程式を積分するということになる．しかし，このような計算のやや長々しい細い点を一々たどってゆくことをしない

で，この二次の振幅が ω_{km} が 2ω，-2ω および 0 に近いときに始めて問題になるような項を含むことを見当つけることは困難なことではない．つまり，このタイプの項は物理的にもっともらしいものなのである．というのは，この種の項はそれぞれその系による 2 個の Planck 量子の吸収，2 個の量子の放出および 1 個の量子の吸収と放出に対応しているからである．一次の摂動計算の結果として得られた 1 量子過程の類推から，摂動が 2 回作用する二次の摂動計算からはこの種の 2 量子過程が予想されるわけである．

しかしながら，不幸にも 2 次の振幅にはさらに ω_{km} のその他の値に対して効いてくるような項も含まれているのである．注意深く分析してみればわかるように，この種の物理的でない項は，摂動（35.10）が $t=0$ で突如としてかけられるという前の仮定から生じているのである．この仮定の結果としての摂動の時間微係数における不連続性が，第31図にみられる二次的なピークの原因になっているようなフーリエ成分を導入することになるのである．現実の問題としては，摂動は通常 $1/\omega$ に比較してはるかに長いはずのある時間にわたって徐々にかけられているはずで，したがって ω に一つの極大をもつ摂動のフーリエ成分の幅も ω に比べて小さくなっているはずである．なお，摂動がかけられている全体の時間 t_0 がかなりの精度で指定されうるためには，この時間々隔は t_0 よりもはるかに短くなっているはずである．突じよとして摂動がかけられるということは，一次の摂動計算では重大な困難を生じるものにはなっていない．その理由は，第31図の二次的なピークを無視することが，たとえこれら二次のピークの高さの低下の仕方が $1/(\omega_{km}-\omega)^2$ 程度にしかならないにしても，常に可能であったためである．しかしながら，二次の計算ではその効果はかなり目立ったものになり，無視することができないのである；つまり，その場合には摂動をゆっくりかけてゆくことが必要になり，このことが計算を複雑なものにするわけである．

ここではこの点をさらに詳しく追求することはしないでおく．しかしこの種の問題は衝突の理論に関連して §37 でもう一度おこってくるはずである．系のハミルトニアンにおける突然の変化が，（35.11）を導いた際のように単なる数学的便法ではなく，物理的な状況の一つの本質的な部分になっている場合については，この節の末尾の方で議論されている．

35-10 断 熱 近 似[1)]

この節の冒頭で注意しておいたように，系のハミルトニアンの時間についての変化が小さいか，ゆっくりしたものか，急激なものかで，それらの系を取り扱うための方法をいろいろと工夫することが可能になる；つまり，これらはそれぞれ摂動近似，断熱近似および瞬間近似に対応している．断熱近似の場合というのは，物理的根拠に基づいて Schrödinger 方程式の解を瞬間的なハミルトニアンの定常的な固有関数を使って近似できる，つまりある時刻でのある特定の固有関数がそれに対応する後のある時刻での固有関数へ連続的に移行するものと予想される場合である．別の言い方をすればそれは，もしも方程

$$H(t)u_n(t)=E_n(t)u_n(t) \tag{35.21}$$

式をそれぞれの瞬間に解くことができるとするならば，$t=0$ にエネルギー $E_m(0)$ をもつ状態 $u_m(0)$ にある系が，$H(t)$ が時間とともに極めてゆっくり変化する限り，時刻 t にはエネルギー $E_m(t)$ をもつ状態 $u_m(t)$ にあるということは十分ありうることだと予想することである．そこで問題になるのは，u を使っての ψ の展開中に他の状態があらわれるという意味でこの予想が達成されていない程度を算定することになる．

この波動関数 ψ は次の時間を含む Schrödinger 方程式を満たしているものである．

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H(t)\psi \tag{35.22}$$

議論を進めてゆくのに，まず ψ を u を使って次のように展開する．

$$\psi=\sum_n a_n(t)u_n(t)\exp\left[(i\hbar)^{-1}\int_0^t E_n(t')dt'\right] \tag{35.23}$$

ただし u_k は規格直交で離散的かつ非縮退の状態であると仮定する．(35.23) を (35.22) に代入し，そこで (35.21) を使うと次式が得られる．

$$\sum_n\left[\dot{a}_n u_n+a_n\frac{\partial u_n}{\partial t}\right]\exp\left[(i\hbar)^{-1}\int_0^t E_n(t')dt'\right]=0$$

$u_k{}^*$ を左からかけておいて全空間にわたって積分すると次のようになる．

$$\dot{a}_k=-\sum_n a_n\langle k|\dot{n}\rangle\exp\left[(i\hbar)^{-1}\int_0^t (E_n-E_k)dt'\right]$$

$$\text{ただし}\quad \langle k|\dot{n}\rangle\equiv\int u_k{}^*\frac{\partial u_n}{\partial t}d^3r \tag{35.24}$$

---

1) M. Born and V. Fock, *Z. Physik*, **51**, 165 (1928).

$\langle k|\dot{n}\rangle$ に対する表式は，(35.21) を時間について微分して求めることができる；すなわち

$$\frac{\partial H}{\partial t}u_n+H\frac{\partial u_n}{\partial t}=\frac{\partial E_n}{\partial t}u_n+E_n\frac{\partial u_n}{\partial t}.$$

ここで $k\neq n$ として $u_k{}^*$ を左からかけて全空間にわたって積分し，(23.21) と (35.21) を使うと次の関係が得られる．

$$\left\langle k\left|\frac{\partial H}{\partial t}\right|n\right\rangle=(E_n-E_k)\langle k|\dot{n}\rangle \quad ただし \quad k\neq n. \tag{35.25}$$

35-11 位相の選び方

さらに $\langle n|\dot{n}\rangle$ に対する表式が必要である．方程式 $\langle n|n\rangle=1$ を時間について微分すれば次の関係が与えられる．

$$\langle \dot{n}|n\rangle+\langle n|\dot{n}\rangle=0$$

これらの二つの項は互いに共軛な複素量になっているから，この関係によってそれぞれは純虚量になり，したがって $\alpha(t)$ を実数として $\langle n|\dot{n}\rangle=i\alpha(t)$ と書くことができる．ここで u_n の位相を大きさ $\gamma(t)$ だけ変化させてみる．固有関数の位相は各瞬間で任意である以上，このような変更は許されていることである．この新しい固有関数 $u_n'=u_ne^{i\gamma(t)}$ に対しては

$$\langle n'|\dot{n}'\rangle=\langle n|\dot{n}\rangle+i\dot{\gamma}=i(\alpha+\dot{\gamma})$$

となる．したがってこの新しい固有関数の位相に対して $\gamma(t)=-\int_0^t\alpha(t')\alpha t'$ という選び方をしておくと，$\langle n'|\dot{n}'\rangle=0$ となる．以下ではすべての位相はこのようなやり方で選ばれてきているものと仮定して，$'$ は省略することにする．

そうすれば (35.25) を (35.24) に代入した結果は次のようになる．

$$\dot{a}_k=\sum_n{}'\frac{a_n}{\hbar\omega_{kn}}\left\langle k\left|\frac{\partial H}{\partial t}\right|n\right\rangle\exp\left[i\int_0^t\omega_{kn}(t')dt'\right] \tag{35.26}$$

ここで和の記号上の $'$ は $n=k$ の項が省かれていることを示している．すべての k に対する (35.26) の方程式をまとめたものはもとの Schrödinger 方程式 (35.22) と正確に同等なものになっている．

ここで (35.26) の各辺にあらわれていて，ゆっくり変化しているものと予想されているすべての量 〔$a_n, \omega_{kn}, u_n, \partial H/\partial t$〕 が実際に時間について一定であると仮定する

ことにすれば，$\dot{a}_k$ を評価することができる．その際，さらに，その系は $t=0$ で状態 m にあると仮定すれば，$a_n=\delta_{nm}$ と置くことができ，結局 $\dot{a}_k$ の評価式として次式が得られる．

$$\dot{a}_k \approx (\hbar\omega_{km})^{-1}\left\langle k\left|\frac{\partial H}{\partial t}\right|n\right\rangle e^{i\omega_{km}t} \qquad k\neq m$$

これはすぐに積分できて，結果は次のようになる．

$$a_k(t) \approx (i\hbar\omega_{km}{}^2)^{-1}\left\langle k\left|\frac{\partial H}{\partial t}\right|n\right\rangle (e^{i\omega_{km}t}-1) \qquad k\neq m \tag{35.27}$$

上に述べたような近似では，(35.27) からわかるように，始状態以外の状態に対する確率振幅は時間について振動しており，たとえ H としては有限の大きさだけ変化しているほどの長い時間経過を通じても，これらの確率振幅は何らはっきりした増大を示さないのである．長い時間をかけた後での，これらの振幅の大きさ $|a_k|$ は，Bohr 周期 $2\pi/\omega_{km}$ 間での H における変化と状態間のエネルギー差 E_k-E_m との比のオーダーになっている．

35-12　摂動論との関連

ハミルトニアンが遷移振動数の一つ，たとえば ω_{km} に殆ど等しい振動数で時間的に振動するときは例外的な事情がおこる，これは共鳴の場合であって，この節の前半の時間を含む摂動論の議論からも予想されるように，Hの極めて小さな変化でさえも長い時間をかければ，かなりの大きさの振幅 a_k をつくり出すことができ，したがって，(35.27) は成り立ち得ないことになる．破綻の理由はこの場合には，もはや $\partial H/\partial t$ の時間による変化を無視できると仮定することは許されず，その結果 (35.26) から (35.27) への移り行きは正しくなくなるのである．

この場合を摂動論との結果との比較ができるような形で考察するために，Hの小部分だけが ω_{km} に近い角振動数 ω で時間的に振動すると仮定する：

$$H=H_0+H'\sin\omega t, \qquad \frac{\partial H}{\partial t}=\omega H'\cos\omega t$$

ただし，H' は H_0 に比べて小さく，またこれらはともに時間的に一定であるとする．そのとき a_n, ω_{kn}, u_n の時間による変化を無視し，さらに前同様 $a_n=\delta_{nm}$ と置けば，(35.26) は次のようになる．

$$\dot{a}_k \approx \frac{\omega}{\hbar\omega_{km}}\langle k|H'|m\rangle(e^{i(\omega_{km}+\omega)t}+e^{i(\omega_{km}-\omega)t})$$

これは容易に積分できて

$$a_k(t) \approx \frac{\omega\langle k|H'|m\rangle}{i\hbar\omega_{km}}\left[\frac{e^{i(\omega_{km}+\omega)t}-1}{\omega_{km}+\omega}+\frac{e^{i(\omega_{km}-\omega)t}-1}{\omega_{km}-\omega}\right] \tag{35.28}$$

となる．

(35.28) からまずわかることは，$\omega_{km} \approx \pm\omega$ の場合には，断熱近似が駄目になるということである．というのは，その場合には (35.28) が時間とともに常に増大することになるからである．次にわかることは，摂動論の結果 (35.11) が再現されているということである．すなわち，もし ω_{km} が $+\omega$ に近ければ，括弧中の第一項は省略でき，括弧の外の ω/ω_{km} を $+1$ で置き換えることができる；もし ω_{km} が $-\omega$ に近ければ括弧中の第二項は省略でき，ω/ω_{km} を -1 で置き換えられる．

35-13　H の不連続な変化

瞬間近似への準備として，まずハミルトニアンが時間的に一定な一つの形から他のものへ不連続的に変化するという場合を考えよう．$t<0$ に対して $H=H_0$，$t>0$ に対して $H=H_1$ と仮定しよう．ただし，

$$H_0u_n=E_nu_n. \qquad H_1v_\mu=E_\mu v_\mu$$

また，u, v はそれぞれ，必ずしも離散的とは限らないが，一つの完全な規格直交関数系をつくるとする．一般解は，a, b が時間を含まないとして

$$\begin{aligned}\psi &= S_n a_n u_n e^{-iE_nt/\hbar} \qquad t<0\\ \psi &= S_\mu b_\mu v_\mu e^{-iE_\mu t/\hbar} \qquad t>0\end{aligned} \tag{35.29}$$

と書ける．

波動方程式 (35.22) は時間について一階だから，空間のすべての点における波動関数は，たとえその時間微分は連続でなくても，$t=0$ で時間の連続関数になっている．その場合には，容易に b を a であらわすことができる．それには $t=0$ で二つの解 (35.29) を等しいと置き，特定の v^* をかけて全座標にわたって積分すればよい：

$$b_\mu = S_n a_n\langle\mu|n\rangle \tag{35.30}$$

もしも，その系が始状態 m にある，つまり $a_n=\langle n|m\rangle$ であるとすれば，(35.30) によって $b_\mu=\langle\mu|m\rangle$ となり，初めの状態と同じエネルギーを持たない終状態が現われるこ

とになる．これは瞬間的に変化しているハミルトニアンをフーリエ分解したときにあらわれうる零でない振動数に属するフーリエ成分の結果である．

35-14 瞬 間 近 似[1]

瞬間近似というのは，要するにハミルトニアンが変化するのには極めて短いが，しかし有限の時間間隔 t_0 を必要するというときにも，（35.30）を使うことにある．このようなやり方によって入ってくる誤差の評価をするために，少々技巧的ではあるが形式的には解きやすい次のような問題を考えよう．$t<0$ に対して $H=H_0$，$t>t_0$ に対して $H=H_1$，$0<t<t_0$ に対して $H=H_i$ とする．中間のハミルトニアン H_i は時間的に一定と仮定し，かつそれは次のようなエネルギー固有関数の規格完全直交系をもつものとする：

$$H_i w_\kappa = E_\kappa w_\kappa$$

本当の解は w を使って定数係数で展開することができる：

$$\psi = \mathrm{S}_\kappa c_\kappa w_\kappa e^{-iE_\kappa t/\hbar} \qquad 0<t<t_0$$

$t=0$ における連続の条件から $c_\kappa = \mathrm{S}_n a_n \langle\kappa|n\rangle$ となり，さらに $t=t_0$ の連続の条件からは

$$\begin{aligned} b_\mu &= \mathrm{S}_\kappa c_\kappa \langle\mu|\kappa\rangle e^{-i(E_\kappa - E_\mu)t_0/\hbar} \\ &= \mathrm{S}_n a_n \mathrm{S}_\kappa \langle\mu|\kappa\rangle e^{-i(E_\kappa - E_\mu)t_0/\hbar} \langle\kappa|n\rangle \end{aligned} \tag{35.31}$$

$t_0=0$ の場合には指数関数は 1 に等しくなり，(23.9′) に似た方程式から b_μ が（35.30）で与えられることがわかる．ただし，このことは当然のことである．

明らかに，瞬間近似は近似として最もよいのは t_0 が小さい場合である．このとき，（35.31）の指数関数は展開できて次のようになる．

$$b_\mu \approx \mathrm{S}_n a_n \mathrm{S}_\kappa \langle\mu|\kappa\rangle \left[1 - \frac{it_0}{\hbar}(E_\kappa - E_\mu)\right] \langle\kappa|n\rangle$$

これは §23 の形式を利用して次のように書き直すことができる．

$$b_\mu \approx \mathrm{S}_n a_n \langle\mu| \left[1 - \frac{it_0}{\hbar}(H_i - H_1)\right] |n\rangle \tag{35.32}$$

つまり，瞬間近似での誤差は小さな t_0 に対しては t_0 に比例しており，簡単な場合には（35.32）を使ってそれを評価することができる．この方程式は H_i が t を含むような

1) W. Pauli, *Handbuch d. Physik* 24, 第一部, p. 164 (1933).

状況に対しても拡張することができる；このような場合には，H_it_0 を $\int_0^{t_0} H_i dt$ で置き換えてやれば，t_0 についてやはり一次のオーダーまで正しい結果が得られる．

(35.32) の特別の場合として興味があるのは，始めと終りのハミルトニアンが同じ ($H_1=H_0$) で，しかもその系が最初ある特定の状態 m にあるという場合である．その場合には

$$b_k=\delta_{km}-\frac{it_0}{\hbar}\langle k|(H_i-H_0)|m\rangle$$

となる．この式は t_0 が十分小さくありさえすれば，H_i-H_0 が H_0 に比べて小さくないときにも使うことができる．一方，前に述べた摂動理論は $H_i-H_0\ll H_0$ で t_0 が大きいときに利用しうる方法なのである．

35-15 振動子の攪乱

断熱近似と瞬間近似の簡単な応用例として，平衡点の位置 $a(t)$ が時間に関係する線形調和振動子を考えよう．この系のハミルトニアンは

$$H(t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\tfrac{1}{2}K[x-a(t)]^2$$

で，瞬間的なエネルギー固有関数は，点 $a(t)$ を中心とする調和振動子の波動関数 (13.13) でエネルギー準位は変わらない：

$$u_n(x)=N_nH_n[\alpha(x-a)]e^{-\frac{1}{2}\alpha^2(x-a)^2}, \qquad E_n=(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_c$$

まず平衡点はゆっくり動くものとして，断熱近似が適用できるような状況を調べてみる．振動子は最初その基底状態 ($n=0$) にあったとすると，ハミルトニアンの時間についての微係数 $\partial H/\partial t=-K(x-a)\dot{a}$ の行列要素は最初の励起状態に関するものだけが零でない．(13.18) を使って，これを求めると，

$$\left\langle 1\left|\frac{\partial H}{\partial t}\right|0\right\rangle=-\frac{K\dot{a}}{\alpha\sqrt{2}}=-K\dot{a}\left(\frac{\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(Km)^{-\frac{1}{4}}$$

となることがわかる．これを (35.27) に代入すれば，第一の励起状態の振幅中の時間を含む因子の係数は次の大きさを持つことがわかる．

$$\frac{K\dot{a}}{\hbar\omega_c{}^2}\frac{(\hbar/2)^{\frac{1}{2}}}{(Km)^{\frac{1}{4}}}=\frac{\dot{a}}{(2\hbar\omega_c/m)^{\frac{1}{2}}} \tag{35.33}$$

分母が零点エネルギーをもつ仮想的な古典振動子の最大速度のオーダーになっているこ

とに注意すれば，（35.33）を物理的に解釈することができる．つまり，もし平衡点が古典振動子の速さに比べてゆるやかに動くならば断熱近似は良い近似になっている．n 番目の励起状態に対しては，平衡点の速さがそれに対応する古典振動子の速さの $1/n$ 倍に比べて小さくなければならないことは容易にわかる．

基底状態にある振動子に対して瞬間近似を適用してやれば，$x=0$ から $x=a$ にまで平衡点の位置をずらした後での n 番目の状態の確率振幅に対して，次の表式が与えられる．

$$\frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\int_{-\infty}^{\infty}u_n^*(x-a)\,e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\,dx=\frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\int_{-\infty}^{\infty}u_n^*(x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2(x+a)^2}\,dx \qquad (35.34)$$

この積分は a の符号を別にすれば，（13.21）式の A_n に対する表式と同一になっており，Hermite 多項式の母関数（13.10）を利用してすでに求めておいたものである．以前の議論（§13）からわかるように，最も励起されやすい状態は変位 a のオーダーの古典論的な振動振幅をもつ状態になる；この結果はこれに対応する古典論の結果と一致している．さらに（35.32）式を使えば，平衡点を動かすのに必要な時間が，古典振動子の周期の $1/n_0$ に比べて小さくなっておれば，瞬間近似はこの場合にも正しいことを示すことができる．ただし n_0 は最も励起されやすい状態の量子数である．

問　　題

1. 荷電 e の一次元調和振動子が，x 軸の正の向きの強さ E の電場によって摂動をうけている．二次の摂動での各エネルギー準位の変化を計算し，さらに誘起された電気的双極子能率を求めよ．またこの問題は正確に解けることを示し，その結果を摂動近似による結果と比較せよ．三次元の等方性振動子に対してこの種の計算を繰り返してみて，振動子の分極率 α を誘起された電気的双極子能率の E に対する比と定義するとき，エネルギーの変化は正確に $-\frac{1}{2}\alpha\mathsf{E}^2$ となることを示せ．

2. 一次元調和振動子が付加的なポテンシャルエネルギー bx^3 による摂動をうけている．各エネルギー準位の変化を二次の摂動で計算せよ．

3. $n=3$ の状態の水素原子に対する一次の Stark 効果を求めよ．なお，エネルギー準位の配置の略図を描き，各準位に付随している量子数を記入せよ．

4. 三つの無摂動状態をもつある系は，摂動をうけたハミルトニアン行列

$$\begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix}$$

であらわされる．ただし $E_2>E_1$ 量 a および b は摂動と見なされるべきものであるが，それら

は同じオーダーで，E_2-E_1 に比べれば小さいとする．縮退のない場合の二次の摂動理論を使って摂動系の固有値を求めよ（この手続きは正しいか）．次に，行列を対角化して正確な固有値を求めよ．最後に，縮退のある場合の二次の摂動論を使い，得られた三つの結果を比較せよ．

5. 試験関数 ψ はある固有関数 u_E から少しだけ異なっていて，$\psi=u_E+\epsilon\psi_1$ とかけるとする．ただし u_E と ψ_1 は規格化されていて，$\epsilon\ll 1$ である．$\langle H\rangle$ は E と ϵ^2 のオーダーの項だけ異なることを示し，その項を求めよ．

6. ある特定のハミルトニアンの最初の $(n-1)$ 個の固有関数が知られているとき，n 番目のエネルギー準位に対する上限を得るのに使える変分法の試験関数の形式的表現を示せ．

7. (32.12) 式の展開における次の項 (R^{-4} のオーダーの) を求めよ．摂動のない基底状態に対するそれらの行列の対角要素は零となって，van der Waals の相互作用への逆四乗に比例する寄与はないことを示せ．

8. (32.13) の級数で，零にならない最初の項を使って $-W(R)$ に対する下限を求めよ．この結果を，変分法計算による結果と比較せよ．

9. van der Waals 相互作用に関連して，§32 で採用した摂動論と変分法とを組合せた方法を使って，基底状態にある水素原子の帯電率の上限を求めよ．

10. 質量 m の粒子がポテンシャル $V(r)=-V_0e^{-r/a}$ によって束縛されているとする．ただし $V_0=\hbar^2/\frac{3}{4}\,ma^2$ 試験関数を $e^{-\alpha r}$ とする変分法を使って，最低のエネルギー固有値のよい限界値を求めよ．

11. 強さ E の一様な電場内に 1 個の水素原子がおかれている．(33.6) を使って，核の位置における全電場を計算せよ．この答えについて物理的な用語による定性的な議論を行なえ．

12. (33.6) を利用して，一様な電場によって水素原子中に誘起される電気的双極子能率を計算し，次に分極率を求めよ．さらに，分極率，電場の強さおよびエネルギーの変化は (33.8) 式で結びつけられることを証明せよ．

13. 水素原子が四重極の対称性をもつ静電ポテンシャル内におかれている．(33.21) 式を利用して，核の無限小近傍につくられる全四重極ポテンシャルの強さの外部四重極ポテンシャルとの比を計算せよ．

14. (31.2) の ψ_s を $|s\rangle$ と書くことにして，(31.4) と (31.6) から次の公式を証明せよ．

$$\langle s|H'|r\rangle=\sum_{q=0}^{s}\sum_{p=0}^{r}W_{q+p+1}\langle s-q|r-p\rangle$$

この公式を使って，(33.17) 式を導け．(D. H. Smith の私信による)

15. 一定距離 R に固定されている 1 個の水素原子と 1 個の点荷電 Ze の三次の摂動エネルギーの，R の大きな値に対する主要項を計算せよ．

16. 調和振動子のすべての状態に対して，WKB 近似は正しいエネルギー固有値を与えることを示せ．

17. $x=0$ で $-V_0$ に等しく，かつ $x=\pm a$ で零になるまでは x とともに一次的に変化し，$|x|>a$ に対しては零であるようなポテンシャル中での質量 m の粒子の一次元の運動に，WKB 法を適用せよ．$mV_0a^2/\hbar^2=40$ の場合，この近似法によって得られるすべての結合エネルギーの準位を求めよ．

18. 大きな r に対して r^{-n} のように減少する三次元の引力ポテンシャルは，$n \leqq 2$ の場合，無限に多くの束縛状態をもつことを，WKB 法を用いて示せ．

19. 基底状態にある水素原子がコンデンサーの極板の間におかれている．このコンデンサーにあるパルス電圧をかけて，$t<0$ では $\mathsf{E}=0$ で $t>0$ では $\mathsf{E}=\mathsf{E}_0 e^{-t/\tau}$ という時間的変化を示す一様な電場がつくられているとする．長い時間をかけた後で，この原子が $2S$ 状態 (200) に存在する確率を一次のオーダーで求めよ．この原子が $2P$ 状態のそれぞれに存在する確率はそれに対応してどうなるか．

20. (35.20) を利用して，エネルギー $\hbar\omega$ の光子による水素原子の光電離に対する全断面積を計算せよ．光子のエネルギーが閾値をあまり上回らない限り，光子の波長は原子の大きさに比べて大きくなっており，その結果 (35.20) を導く際に採用した一様電場の仮定は光電離の問題に対しては適切なものであることを示せ．なお，光波の磁場の効果は電場の効果に比べて無視しうることも示せ．

21. (35.32) 式が H_0 と H_1 とを対称的な形に含んでいない理由を説明せよ．なお，H_i が t を含むが，ただしそれが一次のオーダーだけであるという場合には，$H_i t_0$ を $\int_0^{t_0} H_i(t)\,dt$ で置き換えることができることを証明せよ．

22. 断熱近似における n 番目の状態の励起についての (35.33) のすぐ次の注意が正しいことを証明せよ．

23. 瞬間近似の妥当性について，(35.34) 式の次で述べた注意が正しいことを証明せよ．

24. 質量 3 の水素原子核は放射性で，最大エネルギーが約 17,000 ev の 1 個の電子の放出を伴って，質量 3 のヘリウム核に変化する．最初水素原子中に存在する核外電子に対して瞬間近似が適用できること，また利用しうる他の近似法に対してこの近似法が優れていることを示せ．なお，最初水素原子が $1S$ 状態にあったとした場合，最後のヘリウムイオンが $1S, 2S$ および $2P$ の各状態に見出される確率の数値を計算せよ．さらに，この過程におけるエネルギーのバランスについて定性的な議論を行なえ．

付録：基本的な物理量の数値

$\hbar=1.054\times10^{-27}$erg-sec ………………（プランク定数の 1/2π 倍）
$e=4.80\times10^{-10}$esu ………………………………（電子荷電の大きさ）
$m=0.911\times10^{-27}$g ………………………………………（電子質量）
$M=1.672\times10^{-24}$g ………………………………………（陽子質量）
$a_0=\hbar^2/me^2=5.29\times10^{-9}$cm ……………………………（ボーア半径）
$e^2/a_0=27.2$ev …………………（水素原子の結合エネルギーの 2 倍）
$c=3.00\times10^{10}$cm/sec ………………………………………（光速度）
$\hbar c/e^2=137$ ……………………………………（微細構造定数の逆数）
$e\hbar/2mc=0.927\times10^{-20}$erg/oersted …………………（ボーア磁子）
$mc^2=5.11\times10^5$ev …………………………（電子の静止エネルギー）
$Mc^2=938$ Mev ………………………………（陽子の静止エネルギー）
1 ev$=1.602\times10^{-12}$erg ………………………（1 電子ボルトの定義）
（運動量 1 ev/c に対応する波長）$=12,400$ Å
（エネルギー 1 ev に対応する絶対温度）$=11,600°$K

ISBN4-8427-0000-9

新版 量子力学(上)

1970年 5 月25日　第 1 刷発行
2004年 4 月25日　第24刷発行

訳　者　井上　健
発行者　吉岡　誠

京都市左京区田中門前町87
発行所　株式会社 吉岡書店
電話(075)781－4747／振替京都01030-8-4624

組版／同朋舎・印刷／一進印刷・製本／藤沢製本

ISBN4-8427-0147-1

「物理学叢書」刊行に際して

二十世紀の物理学の進歩は，物質の極微の構造の暴露に，物質の精妙な機構の解明に，驚異的な発展，飛躍をもたらした．その結果，新しい自然力の解放，支配を実現化したばかりでなく，新しい物質の創造，生命の謎への挑戦をも企画せしめつつある．更に，既知の自然力の未曾有の強力な駆使さえ可能にしつつある．二十世紀後半に至って，原子力に，あるいはオートメーションに今や第二の産業革命を喚起せんとするに至った原動力は，物理学の開拓的な創造性によることは言をまたない．更に，現在の物理学は，かつての相対論，量子論の出現にも比すべき革命の前夜にあるといわれているこの時に当たり，物理学の新領域の単なる解説，あるいは時局的な技術書ではなく，真にわが国物理学の発展の糧となるべき良書の出版は緊急の必要事といわねばならぬ．ここに「物理学叢書」を編んで世に送る所以である．

この叢書に収められる原著は，いずれもそれぞれの分野の世界的権威者による定評ある名著に限られるが，前述の精神に鑑みその性格，スタイルに特徴あるものを選ぶと共に，その本質において創造的価値高きものを目標とした．

この叢書が，物理学またはその関連分野へ進む学徒に，よき伴侶として用いられ，真にその血肉となり得ることがわれわれの念願であり，更にこの叢書によって伝えられる海外の学風が，広くわが国の教育，研究へのよき刺戟となり，わが国の明日の科学を築く基礎に貢献するところがあれば幸いである．

(1954年12月)

J. J. Sakurai　桜井明夫訳
現代の量子力学 上下
上 392頁　下 320頁

素粒子物理学の独創的理論家であった著者が，UCLA での多年の講義に基づき書き遺した現代的教科書．非相対論的量子力学の核心が，最近の理論・実験の発展に則し，新しい視点から明快かつ具体的に記述されている．

ジョージアイ　九後汰一郎訳
物理学におけるリー代数
―アイソスピンから統一理論へ―　224頁

Clashow と共に $SU(5)$に基づく素粒子の大統一理論を初めて提唱した著者が，その研究の苦闘の中で体得した豊富な実践的知識を込めて書いた，リー代数とその表現論のわかり易い解説書．

ジーガー　山本恵一・林　真至・青木和徳訳
セミコンダクターの物理学
上・320頁　下・340頁

電子輸送現象にかなりの頁数を費やしており，企業の研究者にとっても最適である．さらに多くの図面により，物理現象の把握に役立つ．

ゲプハルト・クライ　好村滋洋訳
相転移と臨界現象
378頁

ランダウの相転移論から始まり，先年ノーベル賞の対象となったウイルソンのくりこみ群までを，あまり数式を用いず実験例との対応を明らかにするため，豊富な図表を用いて親しみやすく解説した現代的入門書．

ストルコフ・レヴァニューク　疋田朋幸訳
強誘電体物理入門
248頁

強誘電体の相転移を構造相転移の一つとみなし，統一的に基礎的な立場から記述．物質の各論や応用などには殆どふれず，物理的なエッセンスのみを抽出して解説する両著者ともにこの分野の世界的権威である．

キューサック　遠藤裕久・八尾　誠訳
構造不規則系の物理 上下
上 286頁　下 282頁

構造不規則系の研究は物理学の魅力ある分野である．本書は構造不規則系の静的・動物構造，電子状態，またその応用について，実験，理論両面にわたる初めての総合的な教科書．

アブリコソフ　東辻千枝子・松原武生訳
金属物理学の基礎 上下
上 376頁　下 332頁

この分野で世界をリードしてきた著者が固体電子論の立場から集大成した．メソスコピック系や高温超伝導・セラミックスなども明快に解説されており，特に量子効果がマクロに観測される領域の部分は圧巻である．

メンスキー　町田　茂訳
量子連続測定と径路積分
272頁

量子論の基本問題を連続測定の観点から径路積分を使ってとらえ直し，初期宇宙での時間の出現なども論じている．日本語版では多くの追加がされており，読みやすい入門書となっている．

チャンドラセカール　木村初男・山下　護訳
液晶の物理学
原書第2版　544頁

最近20年の新成果を取り入れて全面的に改訂増補された．豊富な実験データの図版を用いて簡潔・明快であり，文献リストも非常に充実したアップツーデートな入門書である．

スティックス　田中茂利・長　照二訳
プラズマの波動 上下
上 344頁　下 364頁

冷たいプラズマの波動の分類と特徴から始まり，プラズマの最も魅力的かつ特徴的なプラズマ粒子の集団的相互作用に基づく無衝突減衰（ランダウおよびサイクロトロン減衰）から弱乱流プラズマの準線形理論へと展開する．

スワンソン　青山秀明他訳
経路積分法
―量子力学から場の理論へ―　502頁

汎関数空間やグラスマン数など，初学者がとまどいやすい部分についても非常に丁寧な導入を行なっており，場の理論およびその素粒子物理への応用について概観するのにも適している．